

TESIS MAESTRÍA EN CIENCIAS FÍSICAS

EFFECTOS DE LA INTERACCIÓN DE INTERCAMBIO EN UNA CINTA HALL

Roberto Esteban Avalos Morales
Maestrando

Dr. César R. Proetto
Director

Miembros del Jurado

Dra. Gisela Bocán (Centro Atómico Bariloche)
Dra. María José Sánchez (Instituto Balseiro-Centro Atómico Bariloche)
Dr. Alexander Hernández (Instituto Balseiro-Centro Atómico Bariloche)

Diciembre de 2019

Teoría de la Materia Condensada – Centro Atómico Bariloche

Instituto Balseiro
Universidad Nacional de Cuyo
Comisión Nacional de Energía Atómica
Argentina

*Si el espacio es infinito estamos en cualquier punto del espacio.
Si el tiempo es infinito estamos en cualquier punto del tiempo.*

Jorge Luis Borges

A mi familia

Índice de símbolos

QHE	Efecto Hall cuántico (del inglés <i>Quantum Hall Effect</i>).
IQHE	Efecto Hall cuántico entero (del inglés <i>Integer Quantum Hall Effect</i>).
q2DEG	Gas cuasi-bidimensional de electrones (del inglés <i>quasi 2-Dimensional Electrons Gas</i>).
2DEG	Gas bidimensional de electrones (del inglés <i>2-Dimensional Electrons Gas</i>).
DOS	Densidad de estados (del inglés <i>Density of States</i>).
LL	Nivel de Landau (del inglés <i>Landau Level</i>).
DFT	Teoría de la funcional densidad (del inglés <i>Density Functional Theory</i>).
KS	Kohn-Sham.
LDA	Aproximación de densidad local (del inglés <i>Local Density Approximation</i>).
LSDA	Aproximación de densidad de espín local (del inglés <i>Local Spin Density Approximation</i>).
TF	Thomas-Fermi.

Índice de contenidos

Índice de símbolos	iii
Índice de contenidos	v
Resumen	vii
Abstract	ix
1. Gas de electrones cuasi-bidimensional y el efecto Hall cuántico entero	1
1.1. Introducción a los q2DEG	1
1.2. Campo magnético perpendicular al q2DEG	4
1.3. Impurezas y ensanchamiento de los niveles de Landau	7
1.4. Efecto Hall cuántico entero	7
1.5. Aproximación de un q2DEG a un 2DEG	9
2. Teoría de la funcional densidad y aproximación de Thomas-Fermi	11
2.1. Principio variacional	11
2.2. Teorema de Hohenberg-Kohn	12
2.3. Ecuaciones de Kohn-Sham	14
2.4. Funcionales de intercambio y correlación	16
2.5. Aproximación de Thomas-Fermi	18
3. IQHE en un 2DEG finito con efectos de apantallamiento	21
3.1. Cinta Hall	21
3.2. Aproximación de Thomas-Fermi-Hartree	24
3.3. Resultados numéricos	26
3.3.1. Consideraciones generales	26
3.3.2. Efectos del campo magnético	28
3.3.3. Comparación de ancho de cinta	30
3.3.4. Comparación entre resultados numéricos con límite analítico	32
3.4. Inclusión del término de Zeeman	34

4. Efectos de la interacción de intercambio	37
4.1. Aproximación de Thomas-Fermi dependiente del espín	37
4.2. Resultados numéricos	39
4.2.1. Consideraciones generales	39
4.2.2. Efectos del campo magnético	41
4.2.3. Comparación de ancho de cinta	43
4.3. Comparación entre Hartree y Hartree con Intercambio	46
Conclusiones y perspectivas	49
A. Información sobre los cálculos numéricos	53
Bibliografía	59
Agradecimientos	63

Resumen

En este trabajo se han estudiado los efectos de la interacción electrónica de Hartree y de intercambio en gases bidimensionales de electrones (2DEG), en el régimen del efecto Hall cuántico entero (IQHE). La particularidad del trabajo es que se consideraron sistemas semiconductores de $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ con bordes en la geometría de la cinta Hall. Para estos sistemas y con un campo magnético aplicado en la dirección de confinamiento, se estudiaron los efectos de la interacción de Hartree y de intercambio en el régimen del IQHE. Para el estudio de los 2DEGs se consideró la aproximación de Thomas-Fermi (TF) como una primera aproximación a un cálculo más elaborado empleando la teoría de la funcional densidad (DFT).

Usando la aproximación TF y la interacción de Hartree se calculó numéricamente los factores de llenado ν para sistemas con la geometría de cinta Hall. Los resultados mostraron regiones de la cinta donde el factor de llenado ν es constante, estas regiones espaciales son denominadas plateaus. Con estas consideraciones los plateaus aparecen solamente para valores de ν pares, esto se debe a que solamente se consideró la interacción de Hartree y se supuso una ocupación degenerada por el espín. En la realidad el IQHE causa que aparezcan plateaus para todos los valores enteros en el factor de llenado, pares e impares.

La originalidad de este trabajo está en considerar la interacción de intercambio y aplicarla en la aproximación TF dependiente del espín. En particular se consideró la aproximación de densidad local de espín (LSDA) para el potencial de intercambio. Con estas consideraciones se obtuvieron plateaus también para factores de llenado ν impares, además de que se discutió la relación entre la formación de los plateaus impares y la interacción de intercambio desde una perspectiva física. Se exploró la relevancia del campo magnético, la temperatura y el ancho de la cinta Hall en el comportamiento que tiene el factor de llenado del sistema, discutiendo además en que regímenes se manifiesta el IQHE.

Palabras clave: EFECTO HALL CUÁNTICO ENTERO, CINTA HALL, THOMAS-FERMI, INTERACCIÓN DE INTERCAMBIO.

Abstract

In this work we have studied the effects of Hartree's electronic and exchange interaction in two-dimensional electron gases (2DEG), in the regime of the integer quantum Hall effect (IQHE). The particularity of the work is that we considered semiconductor systems of $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ with borders in a Hall bar geometry. For these systems and with a magnetic field applied in the confinement direction, the effects of the Hartree and the exchange interaction in the IQHE regime were studied. For the study of the 2DEGs the Thomas-Fermi (TF) approximation was considered as a first approach to a more elaborated calculation employing the density functional theory (DFT).

Using the TF approximation and Hartree interaction, the filling factors ν were calculated numerically for systems with Hall bar geometry. The results showed regions of the bar where the filling factor ν is constant, these spatial regions are called plateaus. With these considerations plateaus only appeared for even values of ν , this is because only Hartree's interaction was considered and we assumed a degenerated spin occupation. In reality the IQHE causes plateaus to appear for all integer values in the filling factor, even and odds.

The originality of this work is that we considered the exchange interaction and applied it in the spin dependent TF approximation. In particular, the spin local density approximation (LSDA) was considered for the exchange potential. With these considerations, plateaus were also obtained for odd filling factors ν , also the relation between odd plateaus formation and exchange interaction was discussed from a physical perspective. It was explored the relevance of magnetic field, temperature and width of the Hall bar in the behaviour that the filling factor of the system has, further discussing in which regimes the IQHE manifests.

Keywords: INTEGER QUANTUM HALL EFFECT, HALL BAR, THOMAS-FERMI, EXCHANGE INTERACTION

Capítulo 1

Gas de electrones cuasi-bidimensional y el efecto Hall cuántico entero

1.1. Introducción a los q2DEG

El estudio experimental del efecto Hall cuántico entero (IQHE) se realiza en sistemas de electrones aproximadamente bidimensionales, esta es una de las razones por lo que sistemas cuasi-bidimensionales de electrones (q2DEG) son de interés. En ellos los electrones pueden moverse libremente en dos dimensiones pero se encuentran confinados en una tercera. Uno de los sistemas mas utilizados para crear q2DEG es el de las heteroestructuras semiconductoras de $GaAs$ (pozo) y $Al_xGa_{1-x}As$ (barra). Se considerará la dinámica de los electrones como de partículas libres con una masa renormalizada debido a la curvatura en la relación de dispersión del fondo de la banda de conducción del semiconductor que actúa como pozo cuántico (aproximación de masa efectiva). Las energías permitidas para los electrones en el q2DEG en ausencia de campo magnético son de la forma

$$E_i(\mathbf{k}) = \varepsilon_i + \frac{\hbar^2 |\mathbf{k}|^2}{2m^*}, \quad (1.1)$$

donde m^* es la masa efectiva para los electrones (en el $GaAs$ se tiene $m^* = 0.067 m_0$, con m_0 como la masa del electrón libre), $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ es el vector de onda bidimensional en el plano xy y ε_i corresponde a las energías de las posibles sub-bandas (la energía está discretizada en la dirección z debido al confinamiento, ver Fig. (1.1)). La función de onda correspondiente a un electrón en el q2DEG puede separarse en una contribución según el plano xy ($\phi(x, y)$) y otra según la dirección z ($\lambda(z)$). La función de onda tridimensional es de la forma $\phi(x, y)\lambda(z)$, donde dependerá únicamente del potencial de confinamiento que se tenga en el hamiltoniano del sistema, en particular se desea que se aproxime lo más posible a una delta de Dirac $\delta(z)$. La componente en el plano xy tiene la forma de onda plana (partícula libre)

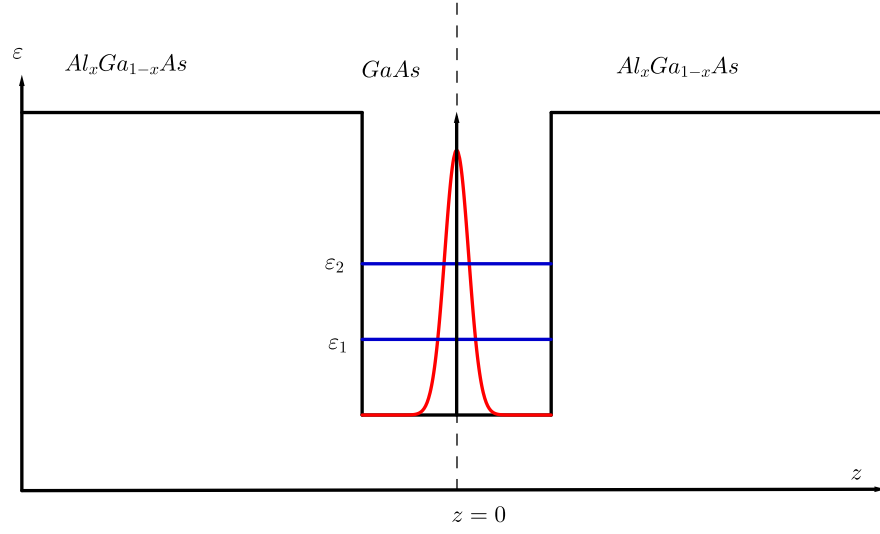


Figura 1.1: Vista esquemática de un q2DEG para un pozo cuántico de $GaAs$ y barreras de $Al_xGa_{1-x}As$. La gráfica en el pozo (color rojo) es una representación de la función de onda según z ($\lambda(z)$) para ilustrar como los electrones son confinados en dicha dirección. ε_1 y ε_2 representan energías discretas de las sub-bandas (color azul) cómo en la Ec. (1.1).

$$\phi(x, y) = \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\rho}}}{\sqrt{A}}, \quad (1.2)$$

con $\boldsymbol{\rho} = (x, y)$ como la coordenada en el plano xy y $A = L_x \times L_y$ el área correspondiente. Si ahora imponemos condiciones de contorno periódicas en el plano xy se tiene que \mathbf{k} debe tomar la forma $\mathbf{k} = 2\pi (n_x/L_x, n_y/L_y)$, donde n_x y n_y son números enteros. Además el número de estados con energía E incluyendo el espín es

$$N_T(E) = \frac{g_e A}{(2\pi)^2} \sum_i \theta(E - \varepsilon_i) \pi k_{F,i}^2, \quad (1.3)$$

donde $\theta(x)$ es la función de Heavyside, $g_e = 2$ es la degeneración de estados debido al espín del electrón, y $k_{F,i}$ es el vector de onda de Fermi de la sub-banda i tal que $E = \varepsilon_i + \hbar^2 k_{F,i}^2 / 2m^*$. Por lo tanto el número de estados con energía E se escribe como

$$N_T(E) = \frac{m^* A}{\pi \hbar^2} \sum_i \theta(E - \varepsilon_i) (E - \varepsilon_i), \quad (1.4)$$

Por lo que la densidad de estados (DOS) del sistema es

$$g(E) = \frac{dN_T(E)}{dE} = \frac{m^* A}{\pi \hbar^2} \sum_i \theta(E - \varepsilon_i), \quad (1.5)$$

Note que la DOS es constante excepto en las energías de las sub-bandas donde da saltos. Una gráfica esquemática de la Ec. (1.5) se puede observar en la Fig. (1.2(a)).

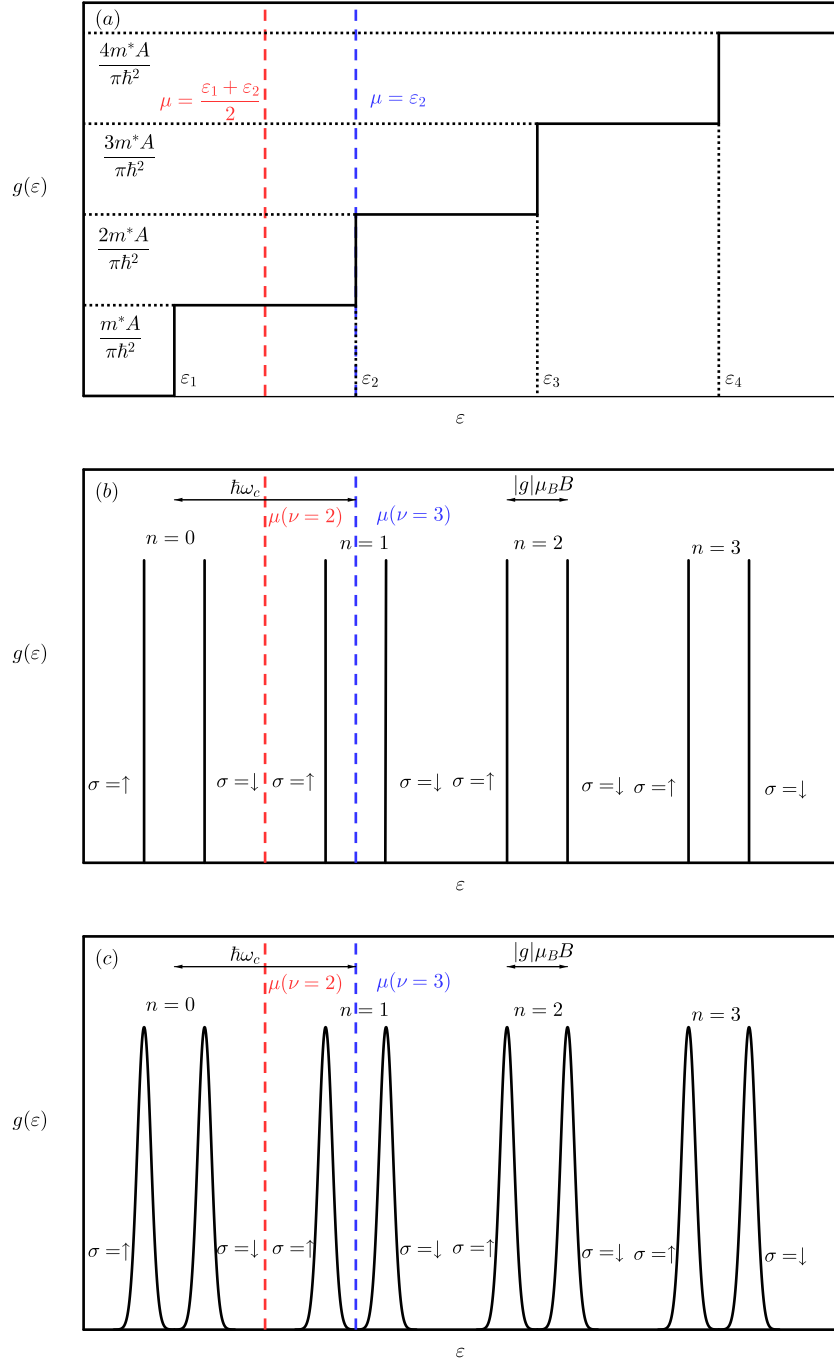


Figura 1.2: Densidad de estados $g(\varepsilon)$ para el q2DEG. (a) Campo magnético cero, (b) campo magnético aplicado y (c) campo magnético aplicado considerando impurezas. El número cuántico n representa el nivel de Landau. Se muestran diferentes potenciales químicos μ para cada gráfica. El factor de llenado del sistema está representado por ν .

1.2. Campo magnético perpendicular al q2DEG

Es de interés para el IQHE el caso en que se aplica un campo magnético perpendicular al q2DEG, es decir en la dirección z . El sistema físico consiste de un q2DEG en el plano xy con los electrones confinados en la dirección z debido a un potencial $V(z)$; además se tiene un campo magnético $\mathbf{B} = B\hat{z}$. Es de importancia notar que el sistema tiene una simetría de traslación en el plano xy . Por lo tanto se puede escribir el hamiltoniano no interactuante como

$$\hat{H} = \frac{(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A})^2}{2m^*} + V(z) - \frac{1}{2}|g|\mu_B\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{B}, \quad (1.6)$$

donde $\hat{\mathbf{p}}$ es el operador momento lineal, \mathbf{A} el vector potencial que genera el campo magnético $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$, m^* es la masa efectiva, g el factor giromagnético ($g = -0.44$ para $GaAs$), μ_B el magnetón de Bohr y $\hat{\boldsymbol{\sigma}} = (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$ el operador de espín cuyas componentes son las matrices de Pauli. Debido a la simetría de traslación en el plano se puede escoger la medida de Landau, por lo tanto se define el vector potencial como $\mathbf{A} = (0, Bx, 0)$. Por lo tanto el hamiltoniano se puede escribir como

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2m^*}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y} + \frac{e}{c}Bx\right)^2 - \frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) - \hat{\sigma}_z\frac{|g|\mu_BB}{2}. \quad (1.7)$$

La ecuación de Schrödinger es $\hat{H}\Psi_{i,n,k_y}^\sigma(x, y, z) = E_{i,n,k_y}^\sigma\Psi_{i,n,k_y}^\sigma(x, y, z)$. Note que el hamiltoniano no es dependiente de forma explícita de la variable y . Además no hay términos que acoplen las variables x y z . Entonces se puede escribir las soluciones para la función de onda tridimensional de la forma

$$\Psi_{i,n,k_y}^\sigma(x, y, z) = \frac{e^{ik_y y}}{\sqrt{L_y}}\phi_{n,k_y}(x)\lambda_i^\sigma(z). \quad (1.8)$$

Es posible separar el hamiltoniano en tres contribuciones $\hat{H} = \hat{H}_\parallel + \hat{H}_\perp - \sigma_z\frac{|g|\mu_BB}{2}$, la primera con los términos en la dirección z , la segunda con la dependencia en x y la tercera un término que depende sólo del espín en la dirección z . Del primer término se tiene

$$\hat{H}_\parallel\lambda_i^\sigma(z) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z)\right]\lambda_i^\sigma(z) = \varepsilon_i^\sigma\lambda_i^\sigma(z), \quad (1.9)$$

donde ε_i^σ son las energías de la sub-banda que dependen del potencial de confinamiento. De la tercera contribución se tiene

$$-\hat{\sigma}_z \frac{|g|\mu_B B}{2} \lambda_i^\sigma(z) = -\sigma \frac{|g|\mu_B B}{2} \lambda_i^\sigma(z), \quad (1.10)$$

donde $\sigma = \pm 1$ dependiendo de la componente z del espín del electrón y $\Delta E_z = -\sigma \frac{|g|\mu_B B}{2}$ es el término de Zeeman. De la segunda contribución se tiene

$$\hat{H}_\perp \phi_{n,k_y}(x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2m^*} \left(\hbar k_y + \frac{e}{c} Bx \right)^2 \right] \phi_{n,k_y}(x) = \varepsilon_{n,k_y} \phi_{n,k_y}(x). \quad (1.11)$$

Considerando la frecuencia de ciclotrón $\omega_c = eB/m^*c$, la longitud magnética $l_B = \sqrt{\hbar c/eB}$ y $x_0 = -l_B^2 k_y$, entonces la ecuación se puede escribir como

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m\omega_c^2}{2} (x - x_0)^2 \right] \phi_{n,k_y}(x) = \varepsilon_{n,k_y} \phi_{n,k_y}(x). \quad (1.12)$$

Note que es la ecuación de un oscilador armónico unidimensional centrado en la coordenada x_0 , por lo que la solución normalizada de la función de onda es

$$\phi_{n,k_y}(x) = \frac{\exp \left[-\frac{(x - l_B^2 k_y)^2}{2l_B^2} \right]}{[\sqrt{\pi} l_B 2^n (n!)]^{1/2}} H_n \left(\frac{x - l_B^2 k_y}{l_B} \right), \quad (1.13)$$

siendo $H_n(x)$ los polinomios de Hermite de orden n . Las energías son de la forma

$$\varepsilon_{n,k_y} \equiv \varepsilon_n = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (1.14)$$

con $n = 0, 1, 2, \dots$. Juntando los tres términos se tiene que la energía total de un electrón en este sistema es

$$E_{i,n,k_y}^\sigma \equiv E_{i,n}^\sigma = \varepsilon_i^\sigma + \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) - \sigma \frac{|g|\mu_B B}{2}, \quad (1.15)$$

que sólo toma valores discretos a diferencia de la Ec. (1.1).

Un nivel de Landau (LL) corresponde a los autoestados representados por la Ec. (1.13) y con la energía de la Ec. (1.14). Además el valor de k_y que define un autoestado $\phi_{n,k_y}(x)$ no afecta el valor de su autoenergía ε_{n,k_y} , por lo tanto los niveles de Landau están degenerados por el valor k_y . Para calcular esta degeneración se considera que el sistema está confinado en una región macroscópica $L_x \times L_y = A$ en el plano xy con condiciones de contorno periódicas en la dirección y , por lo que la distancia entre los posibles estados de k_y es $\Delta k_y = 2\pi/L_y$. Además la función de onda en la dirección x está localizada en un centro $l_B^2 k_y$ con una longitud de localización del orden de la longitud magnética l_B , por lo tanto la separación entre los centros de localización es $l_B^2 \Delta k_y = 2\pi l_B^2 / L_y$. Entonces la degeneración de cada LL es

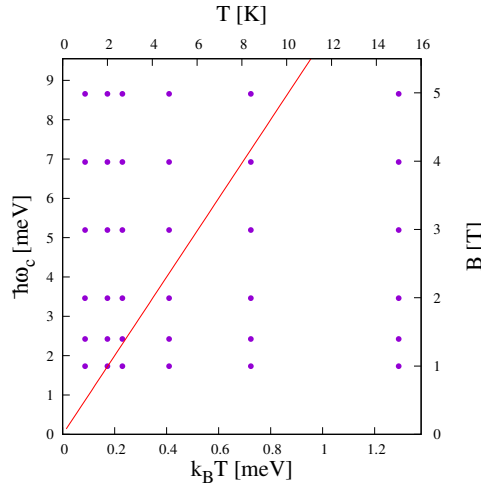


Figura 1.3: Comparación entre la energía de ciclotrón ($\hbar\omega_c$) y la energía térmica ($k_B T$). Los puntos representan sistemas con un determinado campo magnético B a una temperatura T , cada punto mostrado corresponde a un sistema que fue resuelto y será discutido en los siguientes capítulos. La línea roja separa aproximadamente la región cuántica (arriba de la recta) de la clásica (abajo de la recta).

$$N_\phi = \frac{L_x L_y}{2\pi l_B^2} = A \frac{eB}{hc}. \quad (1.16)$$

Para un campo magnético de $B = 1$ T se tiene que $N_\phi/A \approx 0.12 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, que es del mismo orden de magnitud de la densidad electrónica en los q2DEG.

El que la Ec. (1.15) sólo tome valores discretos causa que la densidad de estados $g(\varepsilon)$ para un 2DEG con un campo magnético perpendicular al sistema esté dado por distribuciones delta de Dirac centradas en cada LL.

$$g(E) = \sum_{i,n,\sigma,k_y} \delta(E - E_{i,n}^\sigma) = N_\phi \sum_{i,n,\sigma} \delta(E - E_{i,n}^\sigma). \quad (1.17)$$

Note las diferencias entre las DOS de los sistemas con y sin campo magnético, siendo continua en el caso sin campo y con deltas de Dirac en el caso con campo. La DOS para el sistema con campo magnético puede apreciarse en la Fig. (1.2(b))

Es de interés comparar la energía de ciclotrón ($\hbar\omega_c$) con la energía térmica ($k_B T$) para entender también cuándo un sistema con cierto campo magnético B a temperatura T está en un rango cuántico y cuándo en un rango clásico. No se considera el término de Zeeman para esta comparación ya que es dos órdenes de magnitud menor a la energía de ciclotrón. Para esto consideré que el sistema es cuántico cuando la energía de ciclotrón es mucho más grande que la energía térmica, es decir

$$\frac{\hbar\omega_c}{k_B T} \approx 20 \frac{B}{T} \gg 1. \quad (1.18)$$

La Fig. (1.3) muestra de forma cualitativa esta condición, donde los puntos por arri-

ba de la recta son sistemas donde dominará la energía de ciclotrón (régimen cuántico), mientras que los que están por abajo de la recta son sistemas donde la temperatura será de gran importancia para determinar las propiedades físicas (régimen clásico).

1.3. Impurezas y ensanchamiento de los niveles de Landau

Las impurezas y defectos rompen la degeneración de los niveles de Landau por lo que ocurre un ensanchamiento alrededor de las energías $E_{i,n}^\sigma$, por lo tanto una descripción usando deltas de Dirac no es correcta y es necesario introducir otras ideas. Además este cambio en la densidad de estados es necesario para que se pueda manifestar el efecto Hall cuántico entero (IQHE) [1]. Para describir estos ensanchamientos existen algunas propuestas semi-empíricas y la más popular es describir la densidad de estados usando distribuciones gaussianas [2]

$$g(E) = N_\phi \sum_{i,n,\sigma} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Gamma} \exp\left[-\frac{(E - E_{i,n}^\sigma)^2}{2\Gamma^2}\right], \quad (1.19)$$

donde Γ es una medida del ensanchamiento alrededor de cada LL y se tiene que el ensanchamiento va como $\Gamma = \Gamma_0\sqrt{B}$, siendo Γ_0 una variable libre. Note que cada una de las gaussianas en la Ec. (1.19) están normalizada de tal forma que

$$\int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Gamma} \exp\left[-\frac{(E - E_{i,n}^\sigma)^2}{2\Gamma^2}\right] = 1. \quad (1.20)$$

Un esquema de esta DOS se puede ver en la Fig. (1.2(c)), si se compara con la Fig. (1.2(c)) se aprecia el ensanchamiento de cada LL de una delta de Dirac a una gaussiana.

1.4. Efecto Hall cuántico entero

El efecto Hall cuántico entero (IQHE) ocurre en q2DEG que son sometidos a altos campos magnéticos ($B \sim (1, 10)T$) [3, 4]. Un campo magnético perpendicular al q2DEG cuantificará la energía cinética en el plano formando los niveles de Landau, cada uno con una degeneración $N_\phi = AeB/hc$. Estos sistemas son caracterizados por un parámetro conocido como *factor de llenado* que se define como

$$\nu = \frac{N}{N_\phi}, \quad (1.21)$$

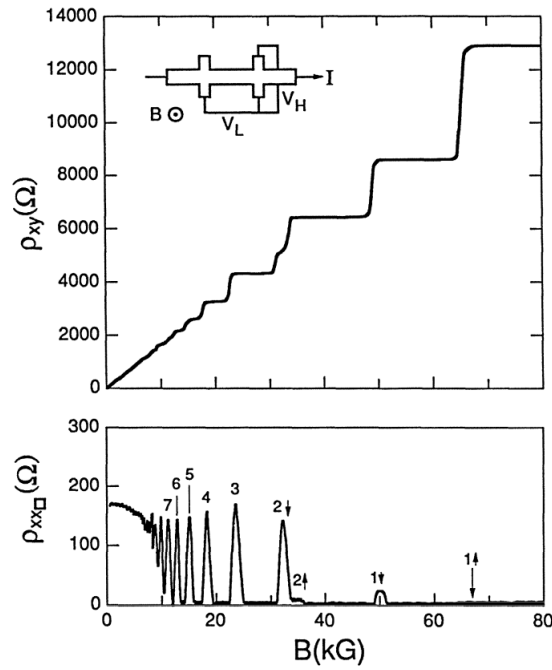


Figura 1.4: Resistividad Hall ρ_{xy} y resistividad longitudinal ρ_{xx} como función del campo magnético para una heteroestructura de GaAs a una $T = 0.5K$. Los números con las flechas arriba de los máximos en ρ_{xx} se refieren al nivel de Landau correspondiente a cada pico. El recuadro en ρ_{xy} es un esquema del experimento siendo B el campo magnético aplicado, I la corriente, V_L el voltaje longitudinal y V_H el voltaje Hall medido. Figura tomada de la referencia [5].

donde N es el número total de electrones. Cuando ν toma valores enteros el potencial químico queda en la brecha de energía entre dos LL (ver Fig.(1.2(b)) y Fig.(1.2(c))) por lo que el sistema se comporta de forma no trivial; lo que sucede es que la resistividad longitudinal ρ_{xx} es cero mientras que la resistividad de Hall ρ_{xy} toma valores cuantificados. El efecto Hall cuántico entero (IQHE) tiene estas características y fue observado por primera vez en 1980 por Klitzing, Dorda y Pepper [6]. En la Fig. (1.4) se tiene una medición típica del IQHE, en donde se observa que para ρ_{xy} existen plateaus en múltiplos enteros de h/e^2 (una constante universal), es decir que $\rho_{xy} = h/\nu e^2$, donde ν es el factor de llenado. Cuando el campo magnético B aumenta también aumenta la degeneración de cada LL por lo que el factor de llenado ν disminuye. Además la resistividad ρ_{xx} tiene oscilaciones, las cuales son conocidas como oscilaciones de Shubnikov-de Haas. Note que los máximos de ρ_{xx} coinciden con las transiciones entre plateaus de ρ_{xy} .

Debido a que la precisión en el experimento es tan alta (mejor que una parte en 10^8) y a que los resultados no dependen de características como dimensiones o bordes del material, las mediciones de la resistencia Hall sirven de estándar para la determinación de la resistencia eléctrica [7, 8]. Con campos magnéticos más altos, la degeneración en los niveles de Landau lleva a factores de llenado menores a uno y que tienen valores fraccionarios. Este es el régimen de efecto Hall cuántico fraccio-

nario (FQHE) y tiene una fenomenología similar al IQHE [9, 10], aunque el origen físico es diferente.

En el recuadro de la Fig. (1.4) se puede ver un esquema de una muestra Hall para medir el IQHE. Las muestras suelen ser rectangulares y se colocan de tal forma que en presencia de un campo magnético B se pueda medir la corriente I , el voltaje longitudinal V_L y el voltaje Hall V_H . Mediante la medición de los voltajes y corriente es que se determina las resistividades como se muestran en la Fig. (1.4).

1.5. Aproximación de un q2DEG a un 2DEG

La idea del q2DEG puede ser llevado a un material real usando heteroestructuras semiconductoras donde hay una interfaz entre dos semiconductores [2] como se puede ver en la Fig. (1.1) para el caso de $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$. Debido a que las brechas de energía de las capas de $GaAs$ y $Al_xGa_{1-x}As$ son diferentes se tiene un pozo de potencial en la región del $GaAs$ (se lo describe en la dirección z), por lo que los electrones quedan confinados en 1 dimensión (eje z). El ancho típico de este pozo es del orden de 10 nm. De esta manera la densidad electrónica en la capa de $GaAs$ ($n(\mathbf{r})$) puede ser aproximada razonablemente como

$$n(\mathbf{r}) \cong \delta(z)n_s(x, y), \quad (1.22)$$

donde $n_s(x, y)$ es la densidad electrónica bidimensional en el plano xy y $\delta(z)$ corresponde a una delta de Dirac, que permite que el sistema puede ser considerando estrictamente como un gas de electrones bidimensional (2DEG) y poder usar todo el formalismo previamente descrito.

En este formalismo hay que considerar los efectos del potencial periódico del sólido sobre los electrones de conducción con la masa renormalizada m^* , además por la interacción entre electrones de la banda de conducción también se debe renormalizar por la constante dieléctrica del medio ϵ (para el $GaAs$ $\epsilon = 12.85$). Por lo tanto la carga de los electrones interactuantes es apantallada y debe considerarse una carga efectiva $e/\sqrt{\epsilon}$. Debido a esto es conveniente describir las ecuaciones de estos sistemas en unidades atómicas efectivas, es decir usar como unidad de distancia el radio de Bohr efectivo $a_0^* = \epsilon\hbar^2/e^2m^*$ ($\simeq 10.15$ nm para el $GaAs$) y como unidad de energía el Hartree efectivo $\text{Ha}^* = m^*e^4/\epsilon^2\hbar^2$ ($\simeq 11.04$ meV para el $GaAs$).

El hecho de que las muestras reales tengan bordes, como se muestra en el recuadro de la Fig. (1.4), causa un gran interés en comprender como estos bordes afectan la densidad electrónica en la muestra. Lo que sucede es que la densidad electrónica $n_s(x, y)$ no es constante, sino que toma valores casi nulos cerca de los bordes y es mayor en las regiones centrales de la muestra. Además hay regiones de la muestra

donde la densidad electrónica es constante, en estas regiones el factor de llenado ν toma valores enteros lo que corresponde a un LL completamente lleno. Estas regiones con un factor de llenado entero, son llamadas plateaus y son de gran interés actualmente tanto en el ámbito experimental como en el teórico.

Hay numerosos trabajos donde se estudian estos plateaus y sus propiedades físicas [11–17] además de varios trabajos teóricos donde se explican la formación de estas regiones [18–24], usando una variedad de aproximaciones.

Este trabajo toma la idea de Oh y Gerhardtts [23] de usar la aproximación de Thomas-Fermi (TF), pero se adiciona la interacción de intercambio para llegar a resultados novedosos que puedan explicar la presencia de los plateaus con factor de llenado impares del IQHE.

Capítulo 2

Teoría de la funcional densidad y aproximación de Thomas-Fermi

Este capítulo introducirá brevemente algunas de las ideas básicas de la DFT. Para más detalles y formalidad es aconsejable consultar el libro de Parr y Yang [25] o el de Engel y Dreizler [26]. La motivación de la DFT es poder calcular propiedades físicas de un sistema en su estado fundamental cuando el sistema en cuestión contiene un número muy grande (N) de partículas interactuantes (en general electrones), que es un problema mucho más complicado que el de un solo electrón.

2.1. Principio variacional

Se considera un sistema de N electrones sometidos a la interacción de Coulomb y a un potencial externo $V(\mathbf{r})$. El hamiltoniano para el sistema es

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U} + \hat{V}, \quad (2.1)$$

donde \hat{T} es la energía cinética, \hat{U} es la interacción de Coulomb y \hat{V} la energía potencial asociada al potencial externo $V(\mathbf{r})$ tal que

$$\hat{V} = \int d^3r V(\mathbf{r}) \hat{n}(\mathbf{r}), \quad (2.2)$$

donde $\hat{n}(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \hat{\mathbf{r}}_i)$ es el operador densidad. Se define una función de onda Φ para los N electrones tal que es antisimétrica ante el intercambio de las coordenadas de dos electrones cualesquiera. $\Phi \equiv \Phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N)$, siendo $\mathbf{x}_i \equiv (\mathbf{r}_i, \sigma_i)$ la coordenada espacial y de espín de cada electrón, entonces la densidad del sistema se define como

$$n(\mathbf{r}) = \langle \Phi | \hat{n}(\mathbf{r}) | \Phi \rangle = N \sum_{\sigma_1 \dots \sigma_N} \int d^3 r_2 \dots d^3 r_N |\Phi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)|^2. \quad (2.3)$$

Además la densidad del sistema debe cumplir la condición $N = \int d^3 r n(\mathbf{r})$ que significa que debe ser N -integrable [26].

El principio variacional nos dice que la energía del estado fundamental puede ser hallada minimizando el valor esperado del hamiltoniano respecto a una función de onda ψ

$$E_0 = \min_{\psi} \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle, \quad (2.4)$$

Si restringimos las funciones de onda posibles a las que cumplan la condición de generar densidades N -integrables, entonces se tiene un mínimo condicionado

$$E_v[n] = \min_{\psi \rightarrow n(\mathbf{r})} \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = F[n] + \int d\mathbf{r} V(\mathbf{r})n(\mathbf{r}), \quad (2.5)$$

donde $F[f]$ significa que F es una funcional de la función $f(\mathbf{r})$. Esta minimización incluye todas las funciones de onda ψ que integran a una dada densidad $n(\mathbf{r})$. Note que en esta definición $F[n] = \min_{\psi \rightarrow n(\mathbf{r})} \langle \psi | \hat{T} + \hat{U} | \psi \rangle$. Si ahora se minimiza $E_v[n]$ con respecto a $n(\mathbf{r})$ se tendrá el principio variacional de interés

$$E_0 = \min_{n(\mathbf{r})} \left\{ F[n] + \int d\mathbf{r} V(\mathbf{r})n(\mathbf{r}) \right\}. \quad (2.6)$$

Una de las características más importantes de este formalismo es que la funcional $F[n]$ es en principio universal ya que es la misma para todos los sistemas de electrones con interacción de Coulomb independientemente del potencial externo $V(\mathbf{r})$. Además se tiene que el mínimo de la funcional $E_v[n]$ es tal que la derivada funcional de la misma cumple

$$\frac{\delta E_v[n]}{\delta n(\mathbf{r})} = 0, \quad (2.7)$$

por lo tanto se satisface también

$$\frac{\delta F[n]}{\delta n(\mathbf{r})} = -V(\mathbf{r}) \quad (2.8)$$

2.2. Teorema de Hohenberg-Kohn

Una densidad $n(\mathbf{r})$ es V -representable si es solución en el estado fundamental para algún hamiltoniano \hat{H} con un respectivo potencial local $V(\mathbf{r})$. La idea que originó la DFT, fue que este potencial $V(\mathbf{r})$ está determinado de forma única (salvo

una constante) por la densidad $n(\mathbf{r})$ del estado fundamental, este es un teorema fundamental conocido como Teorema de Hohenberg-Kohn. La importancia de este teorema radica en que conocer la densidad del estado fundamental $n(\mathbf{r})$ me permite conocer el potencial externo $V(\mathbf{r})$ y por ende (en principio) el hamiltoniano \hat{H} , lo que determina también las funciones de onda del sistema y por tanto todos los observables del sistema. Es decir que conocer la densidad del sistema en el estado fundamental me permite conocer todos los observables del sistema. La ventaja, por supuesto, es que $n(\mathbf{r})$ depende sólo de 3 variables, mientras que $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ depende de $3N$ variables.

Para demostrar el teorema se usa reducción al absurdo. Suponga dos potenciales externos $V(\mathbf{r})$ y $V'(\mathbf{r})$ que difieren en más de una constante, por lo que generan dos hamiltonianos $\hat{H} = \hat{T} + \hat{U} + \hat{V}$ y $\hat{H}' = \hat{T} + \hat{U} + \hat{V}'$ respectivamente; además estos dos potenciales externos se escogen tal que ambos sistemas tienen la misma densidad en el estado fundamental $n(\mathbf{r})$. El hamiltoniano \hat{H} tendrá un autoestado fundamental $|\psi\rangle$ con energía E_0 y el hamiltoniano \hat{H}' un autoestado fundamental $|\psi'\rangle$ con energía E'_0 . Note que $|\psi\rangle$ no es autoestado de \hat{H}' y $|\psi'\rangle$ no es autoestado de \hat{H} debido a que los potenciales difieren en más de una constante. El principio variacional nos dice que en el sistema con potencial $V(\mathbf{r})$ se tiene

$$E_0 = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle < \langle \psi' | \hat{H} | \psi' \rangle = \langle \psi' | \hat{H}' + \hat{V} - \hat{V}' | \psi' \rangle = E'_0 + \int d\mathbf{r} n(\mathbf{r}) [V(\mathbf{r}) - V'(\mathbf{r})]. \quad (2.9)$$

Si se hace lo mismo para el sistema con potencial $V'(\mathbf{r})$ se tiene

$$E'_0 = \langle \psi' | \hat{H}' | \psi' \rangle < \langle \psi | \hat{H}' | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{H} + \hat{V}' - \hat{V} | \psi \rangle = E_0 + \int d\mathbf{r} n(\mathbf{r}) [V'(\mathbf{r}) - V(\mathbf{r})]. \quad (2.10)$$

Sumando ambas desigualdades se llega a la contradicción

$$E_0 + E'_0 < E_0 + E'_0. \quad (2.11)$$

Por lo tanto la hipótesis de que ambos sistemas tengan la misma densidad en el estado fundamental $n(\mathbf{r})$ es errónea. Entonces una densidad del estado fundamental $n(\mathbf{r})$ define de forma única salvo por una constante al potencial externo $V[n(\mathbf{r})]$ [27], por lo que determina el hamiltoniano $\hat{H}[n(\mathbf{r})]$ y todos los observables del sistema que también pueden ser escritos como funcionales de la densidad.

2.3. Ecuaciones de Kohn-Sham

El formalismo desarrollado hasta ahora para la densidad del estado fundamental tiene una clara limitación práctica que es el no conocer $F[n]$, que contiene la descripción exacta de la parte cinética y de interacción de Coulomb en el sistema. Kohn y Sham (KS) propusieron una alternativa para resolver el problema [28], planteando que existe un sistema no interactuante con algún potencial local $V_{KS}(\mathbf{r})$ que tiene la misma densidad en el estado fundamental $n(\mathbf{r})$ que el sistema interactuante con potencial local $V(\mathbf{r})$, además de tener el mismo número de electrones N . Por lo tanto la densidad se obtendrá de minimizar la energía del sistema no interactuante

$$E_{V_{KS}}[n] = T_s[n] + \int d^3r n(\mathbf{r})V_{KS}(\mathbf{r}), \quad (2.12)$$

donde

$$T_s[n] = \min_{\psi \rightarrow n(\mathbf{r})} \langle \psi | \hat{T} | \psi \rangle, \quad (2.13)$$

corresponde a la funcional de energía cinética del sistema no interactuante. Usando el principio variacional se tiene

$$\frac{\delta T_s[n]}{\delta n(\mathbf{r})} = -V_{KS}(\mathbf{r}). \quad (2.14)$$

También se puede escribir la funcional $F[n]$ como

$$F[n] = T_s[n] + E_H[n] + E_{xc}[n], \quad (2.15)$$

donde $E_H[n]$ es la funcional correspondiente a la energía de Hartree y $E_{xc}[n]$ la funcional de la energía de intercambio y correlación (xc). La expresión para la energía de Hartree es

$$E_H[n] = \frac{e^2}{2} \int d^3r \int d^3r' \frac{n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (2.16)$$

por tanto se define el potencial de Hartree como

$$V_H(\mathbf{r}) = \frac{\delta E_H[n]}{\delta n(\mathbf{r})} = e^2 \int d^3r' \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (2.17)$$

y el potencial de intercambio y correlación como

$$V_{xc}(\mathbf{r}) = \frac{\delta E_{xc}[n]}{\delta n(\mathbf{r})}. \quad (2.18)$$

Usando la Ec. (2.8) y la Ec. (2.15) se tiene

$$\frac{\delta T_s[n]}{\delta n(\mathbf{r})} = -V(\mathbf{r}) - V_H(\mathbf{r}) - V_{xc}(\mathbf{r}), \quad (2.19)$$

la cual comparada con la Ec. (2.14) resulta en

$$V_{KS}(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}) + V_H(\mathbf{r}) + V_{xc}(\mathbf{r}). \quad (2.20)$$

El minimizar la energía $E_{V_{KS}}[n]$ equivale a encontrar la energía del estado fundamental del sistema electrónico no interactuante con el potencial de Kohn-Sham V_{KS} , por lo que se quiere resolver la ecuación

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{KS}(\mathbf{r}) \right\} \phi_i^\sigma(\mathbf{r}) = \varepsilon_i^\sigma \phi_i^\sigma(\mathbf{r}), \quad (2.21)$$

donde los orbitales $\phi_i^\sigma(\mathbf{r})$ son construidos a partir de las soluciones menos energéticas de la ecuación de Schrödinger para una partícula, es decir que (i, σ representan la i -ésima energía más pequeña con espín σ (ε_i^σ). Ya que el sistema es no interactuante se puede escribir la densidad de cada polarización de espín como

$$n^\sigma(\mathbf{r}) = \sum_i \Theta_{i\sigma} |\phi_i^\sigma(\mathbf{r})|^2, \quad (2.22)$$

y la densidad total del sistema como

$$n(\mathbf{r}) = \sum_i \sum_\sigma \Theta_{i\sigma} |\phi_i^\sigma(\mathbf{r})|^2, \quad (2.23)$$

donde $\Theta_{i\sigma}$ es una función del peso de ocupación del orbital ϕ_i^σ . Para temperatura nula ($T = 0$) se tiene

$$\Theta_{i\sigma} = \begin{cases} 1 & \varepsilon_F \geq \varepsilon_i^\sigma \\ 0 & \varepsilon_F < \varepsilon_i^\sigma \end{cases}, \quad (2.24)$$

siendo ε_F la energía de Fermi del sistema. Para temperatura finita ($T \neq 0$) se tiene una distribución de Fermi-Dirac

$$\Theta_{i\sigma} = \left[1 + \exp \left(\frac{\varepsilon_i^\sigma - \mu}{k_B T} \right) \right]^{-1}, \quad (2.25)$$

donde k_B es la constante de Boltzmann y μ el potencial químico del sistema tal que $\sum_{i,\sigma} \Theta_{i\sigma} = N$.

La Ec. (2.21) se conoce como la ecuación de Kohn-Sham. Algo a notar es que todo el desarrollo de esta teoría es exacto y el único término desconocido es el de intercambio y correlación. Aparentemente resolver de forma exacta la expresión de $E_{xc}[n]$ es tan complicado como hallar la expresión de $F[n]$ en el problema original,

sin embargo es usual que $E_{xc} < E_H$ por lo que usar aproximaciones de este termino nos puede llevar cerca de la solución real.

Kohn y Sham propusieron un esquema autoconsistente en donde se parte de una densidad de prueba que determina $V_{xc}(\mathbf{r})$ y $V_H(\mathbf{r})$, y usando la Ec. (2.21) se calcula una nueva densidad. Mediante este ciclo se puede resolver el problema con una determinada precisión lo que permite calcular la energía del estado fundamental. Para ello, primero considere la energía del problema no interactuante

$$E_{V_{KS}}[n] = T_s[n] + \int d\mathbf{r} V_{KS}(\mathbf{r})n(\mathbf{r}) = \sum_i \sum_{\sigma} \varepsilon_i^{\sigma}, \quad (2.26)$$

por lo que

$$T_s[n] = \sum_i \sum_{\sigma} \varepsilon_i^{\sigma} - \int d^3r V_{KS}(\mathbf{r})n(\mathbf{r}), \quad (2.27)$$

usando la Ec. (2.5) y la Ec. (2.15) se tiene

$$E_0 = \sum_i \sum_{\sigma} \varepsilon_i^{\sigma} - \frac{e^2}{2} \int d^3r \int d^3r' \frac{n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + E_{xc}[n] - \int d^3r V_{KS}(\mathbf{r})n(\mathbf{r}). \quad (2.28)$$

Resolver las ecuaciones de KS es más simple que las ecuaciones de Hartree-Fock y adicionalmente se incluyen los efectos de intercambio y correlación, como consecuencia del carácter local de $V_{KS}(\mathbf{r})$. El método es tan útil que la DFT se ha convertido en el más usado [29] para cálculos de energía fundamental, densidades electrónicas y estructuras de banda para moléculas y sólidos.

2.4. Funcionales de intercambio y correlación

La formulación de Hohenberg y Kohn describe la energía del estado fundamental de un sistema mediante funcionales de la densidad electrónica, y la formulación de Kohn-Sham da un método autoconsistente para encontrar la densidad y la energía del estado fundamental. Hasta ahora toda la teoría ha sido exacta suponiendo que se conoce la expresión de la funcional de energía de intercambio y correlación (xc), pero en la práctica no es conocida por lo que se usan diferentes aproximaciones. La DFT puede ser una aproximación buena dependiendo de lo buena que sea la aproximación de xc. Volvamos a la definición de la Ec. (2.15) y la definición de la funcional $F[n]$

$$E_{xc}[n] = F[n] - T_s[n] - E_H[n] = T[n] - T_s[n] - U[n] - E_H[n], \quad (2.29)$$

donde $T[n]$ y $U[n]$ son las funcionales de energía cinética e interacción de Coulomb para el sistema interactuante respectivamente. Además se puede separar a esta funcional en una parte que corresponde a la energía de intercambio $E_x[n]$ y otra que corresponde a la energía de correlación $E_c[n]$ tal que

$$E_{xc}[n] = E_x[n] + E_c[n], \quad (2.30)$$

está forma de escribir al xc es útil ya que para muchos sistemas se puede escribir de forma exacta el término $E_x[n]$ por lo que la única aproximación sería en el término de correlación. El término de intercambio corresponde a las contribuciones de la energía de Coulomb debido a la antisimetría de la función de onda, y la correlación contiene las contribuciones de la energía de Coulomb restantes y las contribuciones de la energía cinética interactuante. Por lo tanto la energía de intercambio se define como

$$E_x[n] = E_x[n^\uparrow, n^\downarrow] = -\frac{e^2}{2} \sum_{i,j,\sigma} f_i^\sigma f_j^\sigma \int d^3r \int d^3r' \frac{\phi_i^{\sigma*}(\mathbf{r}) \phi_j^{\sigma*}(\mathbf{r}') \phi_j^\sigma(\mathbf{r}) \phi_i^\sigma(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (2.31)$$

donde f_i^σ es el peso de ocupación del estado del orbital ϕ_i^σ de KS, tomando valores entre 0 y 1. Esta funcional no depende de forma explícita de la densidad por lo que determinar el potencial de intercambio $V_x^\sigma = \delta E_x / \delta n^\sigma(\mathbf{r})$ puede ser complicado. Para evitar esta complicación es que se usan diferentes aproximaciones para la energía de intercambio que sí dependen de forma explícita de la densidad en lugar de la Ec. (2.31). Una aproximación muy usada es la aproximación de densidad local (LDA), y para sistemas polarizados en espín la aproximación de densidad local de espín (LSDA). En esta aproximación se considera que la densidad varía lo suficientemente lento en una pequeña región del espacio tal que la energía de intercambio se puede aproximar de forma local con la energía de un gas de electrones homogéneo (HEG) a la misma densidad. La aproximación LDA para la energía de intercambio tiene la forma

$$E_x^{LDA}[n] = \int d^3r n(\mathbf{r}) \epsilon_x^{HEG}(n), \quad (2.32)$$

donde $\epsilon_x^{HEG}(n)$ es la energía de intercambio por partícula para un gas de electrones homogéneo. El potencial de intercambio del sistema es

$$V_x^{\sigma, LDA}[n^\sigma] = \frac{\delta E_x^{LDA}[n^\uparrow, n^\downarrow]}{\delta n^\sigma}. \quad (2.33)$$

La aproximación LSDA se define como

$$E_x^{LSDA}[n^\uparrow, n^\downarrow] = \frac{1}{2} \{ E_x^{LDA}[2n^\uparrow] + E_x^{LDA}[2n^\downarrow] \}, \quad (2.34)$$

por lo que su potencial de intercambio será

$$V_x^{\sigma, LSDA}[n^\sigma] = \frac{\delta E_x^{LSDA}[n^\uparrow, n^\downarrow]}{\delta n^\sigma}. \quad (2.35)$$

En el caso de que el sistema sea tridimensional (3D) se tiene

$$\epsilon_x^{HEG}(n) = -\frac{3e^2}{4} \left[\frac{3}{\pi} n(\mathbf{r}) \right]^{1/3} \quad V_x^{\sigma, LSDA}[n^\sigma] = -e^2 \left[\frac{6}{\pi} n^\sigma(\mathbf{r}) \right]^{1/3}. \quad (2.36)$$

Si el sistema es bidimensional (2D) se tiene [30]

$$\epsilon_x^{HEG}(n) = -\frac{4e^2}{3} \left[\frac{2}{\pi} n(\mathbf{r}) \right]^{1/2} \quad V_x^{\sigma, LSDA}[n^\sigma] = -4e^2 \left[\frac{1}{\pi} n^\sigma(\mathbf{r}) \right]^{1/2}. \quad (2.37)$$

Salvo una constante, en la LSDA el potencial de intercambio bidimensional es proporcional a $\sqrt{n(\mathbf{r})}$, lo que será de relevancia en los siguientes capítulos.

2.5. Aproximación de Thomas-Fermi

La aproximación de Thomas-Fermi (TF) es un primer acercamiento a la DFT ya que provee una funcional para la energía de un gas de electrones en un potencial electrostático externo $V(\mathbf{r})$ en función de su densidad electrónica $n(\mathbf{r})$. Es una aproximación semi clásica que se vuelve exacta para un gas de electrones uniforme [25, 26]. Nuestro interés en esta aproximación es que permite escribir la densidad electrónica de forma diferente a la Ec. (2.23), y en su lugar será una ecuación dependiente del potencial externo $V(\mathbf{r})$. Desde el punto de vista práctico, evita resolver las ecuaciones de KS, y da un vínculo directo entre la densidad $n(\mathbf{r})$ y el potencial $V(\mathbf{r})$.

Primero considere que para un gas de electrones libres la ecuación de Schrödinger es

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\mathbf{r}), \quad (2.38)$$

y las autoenergías para este sistema son de la forma

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (2.39)$$

donde \mathbf{k} es su vector de onda. Para este sistema se puede escribir la densidad electrónica como

$$n(\mathbf{r}) = \int d\varepsilon g(\varepsilon) f_{FD}(\beta(\varepsilon - \mu)), \quad (2.40)$$

donde $g(\varepsilon)$ es la densidad de estados del sistema, $\beta = 1/k_B T$ siendo k_B la constante de Boltzmann y T la temperatura del sistema, μ el potencial químico del sistema y f_{FD} la distribución de Fermi Dirac ($f_{FD}(x) = (1 + e^x)^{-1}$) [31]. A temperatura nula, el nivel de Fermi de este sistema está dado por la energía de Fermi $\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$, donde k_F es el vector de onda correspondiente.

Ahora se va considerar la ecuación de Schrödinger con el potencial electrostático externo $V(\mathbf{r})$, por lo que se tiene

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_i(\mathbf{r}) - eV(\mathbf{r}) \psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\mathbf{r}). \quad (2.41)$$

Lo que plantea la aproximación de TF es que si $V(\mathbf{r})$ varía lo suficientemente lento (con respecto a la longitud $1/k_F$), entonces la energía de un electrón solo se verá modificada de su valor de electrón libre por el potencial electrostático local, es decir

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - eV(\mathbf{r}). \quad (2.42)$$

Hay que tener en cuenta que esta aproximación está pensada para potenciales que varíen lento, esto presenta una limitación para los casos en que la aproximación puede ser utilizada.

Suponemos que las soluciones a la Ec. (2.41) son electrones con energías modificadas como la Ec. (2.42). Si se considera este cambio de energía en conjunto con la Ec. (2.40) se tiene que la densidad electrónica en la aproximación de TF es [32]

$$n(\mathbf{r}) = \int d\varepsilon g(\varepsilon) f_{FD}(\beta(\varepsilon - eV(\mathbf{r}) - \mu)). \quad (2.43)$$

Note que calcular la densidad electrónica mediante la Ec. (2.43) es significativamente más sencillo que con la Ec. (2.23), por lo que es de gran utilidad como una primera aproximación a la DFT.

Otro de los resultados más populares de la aproximación de TF es que la funcional de la energía cinética tridimensional va como

$$T_s^{TF}[n] = \frac{3\hbar^2 (3\pi)^{2/3}}{10m} \int d^3r n(\mathbf{r})^{5/3}. \quad (2.44)$$

Si se regresa al planteamiento de la energía fundamental del sistema de la Ec. (2.28), se considera como potencial externo $V_{ext}(\mathbf{r})$ (no confundir con el potencial electrostático $V(\mathbf{r})$ descrito en esta sección) y se desprecia por completo el intercambio y la

correlación, entonces la energía fundamental en la aproximación de TF es

$$E_{TF} = T_s^{TF}[n] + \frac{e^2}{2} \int d^3r \int d^3r' \frac{n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + \int d^3r V_{ext}(\mathbf{r})n(\mathbf{r}). \quad (2.45)$$

Este trabajo usará la aproximación de TF para estudiar las modificaciones introducidas en la densidad electrónica por el campo magnético B en el régimen del IQHE, de forma similar a como lo plantean Oh y Gerhardts [23].

Capítulo 3

IQHE en un 2DEG finito con efectos de apantallamiento

3.1. Cinta Hall

La geometría que se va a estudiar es la de una cinta infinita bidimensional de ancho $2d$, la cual es llamada cinta Hall. Este sistema puede ser descrito como un 2DEG donde los electrones estarán confinados en un plano donde se tendrá una densidad electrónica bidimensional $n_s(x, y)$. La cinta corresponderá a la interfaz entre 2 semiconductores que ocupan los espacios $z > 0$ y $z < 0$ con una constante dieléctrica ϵ . Se tienen dos compuertas metálicas extendidas en $x < -d$ y $x > d$ con potenciales constantes V_L y V_R respectivamente. La importancia de V_L y V_R radica en que son condiciones de frontera que debe cumplir el sistema, además de que pueden causar asimetrías en la densidad $n_s(x, y)$. La cinta Hall es definida a lo largo de la dirección y en la interfaz (es decir en el plano xy), por lo que tiene invarianza traslacional a lo largo de la dirección y . Esta geometría es mostrada en la Fig. (3.1).

Los electrones están distribuidos a lo largo de la cinta Hall junto con un fondo neutralizante uniforme positivo (jellium) en presencia de un campo magnético aplicado en la dirección z . Entonces la densidad de carga es solamente función de x y z , además tiene la forma $\rho(x)\delta(z)$. La densidad bidimensional de carga $\rho(x)$ puede escribirse como

$$\rho(x) = e [n_0 - n_s(x)], \quad (3.1)$$

donde $n_s(x)$ es la densidad de electrones en la interfaz y n_0 la densidad de partículas positivamente cargadas. Además conviene definir una densidad electrónica promedio de la cinta Hall

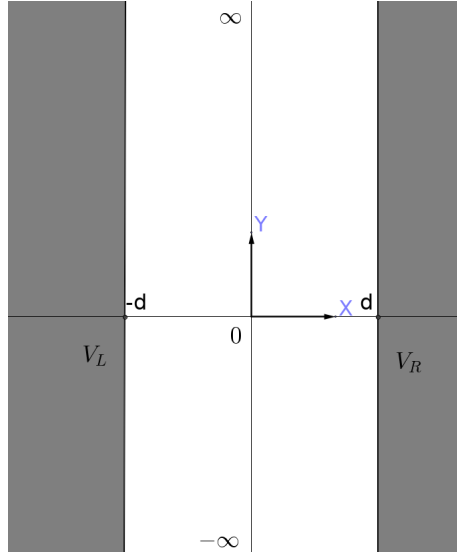


Figura 3.1: Geometría de la cinta Hall en el plano xy . La cinta es infinita en la dirección y . El campo magnético B es perpendicular al plano. V_L y V_R son los potenciales de las compuertas metálicas.

$$\bar{n} = \frac{1}{2d} \int_{-d}^d dx n_s(x). \quad (3.2)$$

Note que el factor de llenado ahora también será una propiedad local debido a que la densidad electrónica $n_s(x)$ lo es. Considere la Ec. (1.21), si se divide tanto el numerador como el denominador para el área A se obtiene $\nu = n_s/n_\phi$, donde n_s es la densidad electrónica bidimensional y donde n_ϕ es la degeneración por unidad de área. Ya que la densidad electrónica es una propiedad local, el factor de llenado también debe serlo tal que

$$\nu(x) = \frac{n_s(x)}{n_\phi}, \quad (3.3)$$

Para los LL se tiene que $n_\phi = 1/2\pi l_B^2$ donde l_B es la longitud magnética del material. Por lo tanto el factor de llenado dependiente de la posición se escribe como

$$\nu(x) = 2\pi l_B^2 n_s(x), \quad (3.4)$$

que es una magnitud adimensional.

Aunque la cinta Hall es simétrica con respecto a $x = 0$, la densidad electrónica $n_s(x)$ puede ser asimétrica si es que se aplican voltajes en las terminales metálicas tal que $V_L - V_R \neq 0$. Debido a la invarianza traslacional en la dirección y , el potencial electrostático $V(x, z)$ se puede determinar con una ecuación de Laplace bidimensional en el plano xz con dos condiciones de frontera. La primera condición es la impuesta por los potenciales V_L y V_R en los bordes entre la interfaz y las compuertas metálicas. La segunda, dentro de la cinta Hall, es que la derivada del potencial

electrostático en la dirección z debe estar dada por la densidad de carga $\rho(x)$. Ya que las dos condiciones son independientes entre si, pueden ser tratados de forma separada y el potencial electrostático puede escribirse como $V(x, z) = V_1(x, z) + V_2(x, z)$, donde V_1 cumple la primera condición de frontera y V_2 la segunda, además de que ambas partes deben satisfacer la ecuación de Laplace bidimensional

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 V_1(x, z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V_1(x, z)}{\partial z^2} &= 0 \\ \frac{\partial^2 V_2(x, z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V_2(x, z)}{\partial z^2} &= 0\end{aligned}\quad (3.5)$$

El potencial $V_1(x, z)$ está restringido sólo por la condición

$$V_1(x, z = 0) = \begin{cases} V_L, & x < -d \\ V_R, & x > d \end{cases}, \quad (3.6)$$

y la solución puede ser hallada mediante teoría de funciones analíticas [33],

$$V_1(x, z) = V_R + \frac{V_L - V_R}{\pi} \operatorname{Im} \ln \left\{ \frac{\zeta}{d} - \sqrt{\frac{\zeta^2}{d^2} - 1} \right\}, \quad (3.7)$$

siendo $\zeta = x + iz$ una variable compleja. Para $|x| < d$ y $z = 0$ la Ec. (3.7) queda como

$$V_1(x) = \frac{V_L + V_R}{2} + \frac{V_L - V_R}{\pi} \arcsen\left(\frac{x}{d}\right). \quad (3.8)$$

En caso de que $V_L \neq V_R$ se tendrá un potencial asimétrico según x como se esperaba. Note que en el caso de que $V_L = V_R = 0$ se tendrá $V_1(x) = 0$.

El potencial $V_2(x, z)$ depende de la densidad de carga, por lo que para $|x| < d$ la condición es

$$\frac{\partial V_2}{\partial z}(x, z = 0^+) - \frac{\partial V_2}{\partial z}(x, z = 0^-) = -\frac{4\pi}{\epsilon} \rho(x). \quad (3.9)$$

La solución a esta ecuación diferencial es [34]

$$V_2(x) = \frac{2}{\epsilon} \int_{-d}^d dt \rho(t) \ln \left| \frac{\sqrt{(1 - x^2/d^2)(1 - t^2/d^2)} + 1 - xt/d^2}{(x - t)/d} \right|. \quad (3.10)$$

Para una densidad de carga $\rho(x)$, el potencial electrostático $V_2(x)$ es único y está determinado por la Ec. (3.10). Por otra parte, dada una densidad $\rho(x)$ arbitraria, la Ec. (3.10) no puede ser resuelta de forma analítica. Gran parte de los cálculos posteriores donde se obtiene $V_2(x)$ fueron obtenidos mediante métodos numéricos. Una integral con solución analítica de interés, correspondiente a una densidad constante, es

$$\int_{-d}^d dt \ln \left| \frac{\sqrt{(1 - x^2/d^2)(1 - t^2/d^2)} + 1 - xt/d^2}{(x - t)/d} \right| = \pi d \sqrt{1 - \frac{x^2}{d^2}}, \quad (3.11)$$

por lo que la Ec. (3.10) se puede reescribir como

$$V_2(x) = \frac{2\pi d e n_0}{\epsilon} \sqrt{1 - \frac{x^2}{d^2}} - \frac{2e}{\epsilon} \int_{-d}^d dt n_s(t) \ln \left| \frac{\sqrt{(1 - x^2/d^2)(1 - t^2/d^2)} + 1 - xt/d^2}{(x - t)/d} \right|. \quad (3.12)$$

La energía potencial de un electrón (potencial de Hartree) es $V_H = -e [V_1(x) + V_2(x)]$. En el caso de que los potenciales de las compuertas metálicas sean 0 ($V_L = V_R = 0$), se tiene que el potencial de Hartree es

$$V_H(x) = -\frac{2\pi e^2 n_0 d}{\epsilon} \sqrt{1 - \frac{x^2}{d^2}} + \frac{2e^2}{\epsilon} \int_{-d}^d dt n_s(t) \ln \left| \frac{\sqrt{(1 - x^2/d^2)(1 - t^2/d^2)} + 1 - xt/d^2}{(x - t)/d} \right|. \quad (3.13)$$

Note que el primer término de la Ec. (3.13) corresponde al potencial electrostático generado por las cargas positivas uniformemente distribuidas en la cinta, mientras que el segundo término corresponde al potencial electrostático de las cargas negativas que tienen una densidad electrónica $n_s(x)$. Llamemos a este primer término

$$V_0(x) = -\frac{2\pi e^2 n_0 d}{\epsilon} \sqrt{1 - \frac{x^2}{d^2}}, \quad (3.14)$$

ya que será de utilidad para evidenciar el efecto del potencial de Hartree en la densidad electrónica $n_s(x)$.

3.2. Aproximación de Thomas-Fermi-Hartree

En esta aproximación la densidad electrónica $n_s(x)$ tiene la forma de la Ec. (2.43), además se considerará en este capítulo solamente la influencia del potencial de Hartree y se despreciará el potencial de intercambio, por lo tanto se tiene la densidad electrónica a una temperatura T

$$n_s(x) = \int d\varepsilon g(\varepsilon) f_{FD} [(\varepsilon + V_H(x) - \mu) / k_B T]. \quad (3.15)$$

Si ahora se aplica un campo magnético $\mathbf{B} = B\hat{z}$ (perpendicular a la cinta Hall), entonces se puede usar el formalismo desarrollado para los niveles de Landau. En este capítulo se supondrá una ocupación degenerada por el espín, entonces la Ec. (1.17) nos da la densidad de estados para el sistema

$$g(\varepsilon) = \frac{1}{\pi l_B^2} \sum_{n=0}^{\infty} \delta \left[\varepsilon - \hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) \right], \quad (3.16)$$

donde $\omega_c = eB/m^*c$ y $l_B^2 = \sqrt{\hbar c/eB}$. La densidad electrónica se reescribe como

$$n_s(x) = \frac{1}{\pi l_B^2} \sum_{n=0}^{\infty} f_{FD} \left[\left(\hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + V_H(x) - \mu \right) / k_B T \right], \quad (3.17)$$

y el factor de llenado será

$$\nu(x) = 2 \sum_{n=0}^{\infty} f_{FD} \left[\left(\hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + V_H(x) - \mu \right) / k_B T \right] \quad (3.18)$$

Las Ec. (3.2), (3.13) y (3.17) forman un conjunto de ecuaciones autoconsistentes que dan una solución única para el sistema $\{n_s(x), V_H(x), \mu\}$. Las unidades más naturales para el potencial de Hartree son las de Hartree efectivo (Ha^*), por lo que se define un potencial de Hartree adimensional $\widetilde{V}_H(x) = V_H(x)/\text{Ha}^*$. De forma equivalente se define una densidad electrónica adimensional usando las unidades del radio de Bohr (a_0^*) efectivo tal que $\widetilde{n}_s(x) = a_0^{*2} n_s(x)$. Además se introduce un parámetro adimensional $r_0^2 = 1/\pi a_0^{*2} n_0$ para caracterizar la densidad de carga positiva. Con estas consideraciones se puede reescribir las tres ecuaciones autoconsistentes como

$$\widetilde{n}_s(x) = \frac{a_0^{*2}}{\pi l_B^2} \sum_{n=0}^{\infty} f_{FD} \left[\left(\hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + V_H(x) - \mu \right) / k_B T \right], \quad (3.19)$$

$$\widetilde{V}_H(x) = -\frac{2d}{a_0^* r_0^2} \sqrt{1 - \frac{x^2}{d^2}} + \frac{2d}{a_0^*} \int_{-1}^1 dt \widetilde{n}_s(td) \ln \left| \frac{\sqrt{(1 - x^2/d^2)(1 - t^2)} + 1 - xt/d}{x/d - t} \right|, \quad (3.20)$$

$$\frac{\bar{n}}{n_0} = \frac{\pi r_0^2}{2} \int_{-1}^1 dx \widetilde{n}_s(xd). \quad (3.21)$$

Se pretende aquí entender cómo cambia el factor de llenado y el potencial de Hartree dependiendo del campo magnético que se aplica (B), y del ancho de la cinta Hall (d). Por comparación con los resultados de Oh y Gerhardts [23], pudimos controlar la precisión de nuestros resultados numéricos.

3.3. Resultados numéricos

3.3.1. Consideraciones generales

Las ecuaciones fueron resueltas para sistemas con diferentes campos magnéticos y anchos d de cinta Hall. Los parámetros que se dejaron fijos son la relación entre la densidad electrónica promedio y la densidad de cargas positivas tal que $\bar{n}/n_0 = 0.458$, y la densidad electrónica de carga positiva tal que $r_0 = 1$. Además se consideró como material semiconductor el *GaAs* que tiene como permitividad eléctrica $\epsilon \simeq 12.85$, factor giromagnético $g \simeq -0.44$, masa efectiva $m^* \simeq 0.067m_0$ (m_0 es la masa del electrón), radio de Bohr efectivo $a_0^* \simeq 101.5 \text{ \AA}$ y Hartree efectivo $\text{Ha}^* \simeq 11.04 \text{ meV}$. En particular son de interés las gráficas del factor de llenado ya que se esperan plateaus en los valores enteros por el IQHE.

Un ejemplo se muestra en la Fig. (3.2). Claramente hay plateaus en los llenados pares y ninguno en los impares. Esto se debe a que se ha supuesto que los dos estados de espín son degenerados, lo que implica que hay dos niveles de Landau con la misma energía (uno con espín up y otro con espín down). El sistema llena indistintamente estos dos LL simultáneamente ocasionando que estos se llenen de dos en dos, por lo que los únicos plateaus permitidos son los pares.

Otro resultado es que la geometría de la cinta causa que el potencial de Hartree sea mas profundo en el centro de la cinta, esto favorece que los electrones se acumulen allí llenando varios LL. Por el contrario, a medida que uno se acerca a los extremos hay cada vez menos electrones aproximándose a densidad nula. Note que la gráfica es totalmente simétrica, algo que se espera de considerar los voltajes de las compuertas metálicas como $V_L = V_R = 0$. Las contribuciones de V_H y μ son mayores que $\hbar\omega_c$, lo que los hace los términos dominantes en la Ec. (3.17). El punto donde se intersecan el potencial químico y el potencial de Hartree es aproximadamente donde el factor de llenado empieza a crecer significativamente, se debe a la importancia de estos dos términos aunque se debe considerar efectos de la temperatura y de la energía $\hbar\omega_c$.

Un LL está ocupado cuando tiene al menos un electrón y lleno cuando alcanzó su máxima ocupación, los factores de llenado enteros corresponden a tener todos los LL ocupados también llenos. Hay que considerar que la energía cinética alcanza un mínimo cuando todos los LL ocupados están llenos [31]. También considere que si todos los LL ocupados están llenos, entonces para agregar más electrones es necesario ocupar un nuevo LL con un costo de energía adicional de $\hbar\omega_c$. Los plateaus son regiones espaciales donde todos los LL ocupados están llenos, por el contrario las regiones donde varía el factor de llenado ν hay un LL que está siendo ocupado pero no está lleno (dos niveles considerando el espín). En las regiones espaciales

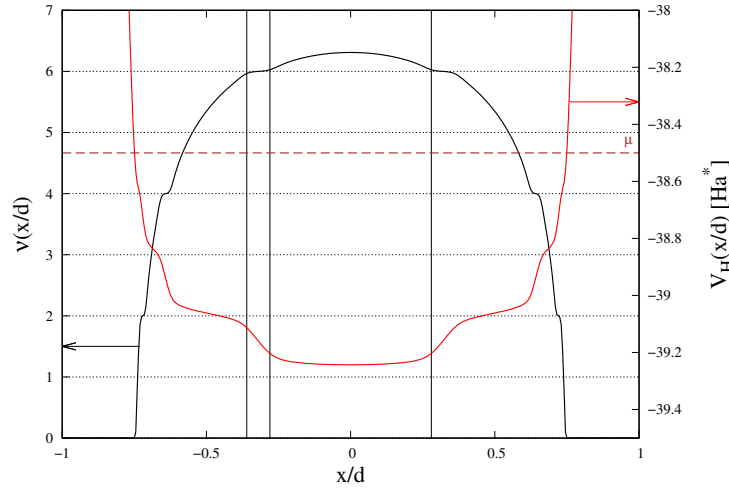


Figura 3.2: Factor de llenado $\nu(x)$ y potencial de Hartree $V_H(x)$ para $B = 1.4 \text{ T}$, $d = 50 a_0^*$ y $T = 2.0 \text{ K}$. La escala para el factor de llenado está en el eje izquierdo y para el potencial de Hartree en el eje derecho. La línea de trazos describe el potencial químico μ del sistema. Las líneas verticales indican aproximadamente los bordes de los plateaus con $\nu = 6$.

donde hay plateaus la energía cinética es minimizada pero conlleva un costo energético debido al potencial electrostático, cuando es más costoso aumentar la energía de Hartree antes que llenar un nuevo LL es que se sale del régimen de los plateaus. Por lo tanto las regiones espaciales con plateaus en el factor de llenado son también donde el potencial de Hartree exhibirá una mayor variación (del orden de $\hbar\omega_c$). Los plateaus también son llamados regiones incompresibles debido a que no se puede agregar electrones sin un alto costo energético. Las regiones donde el llenado varía suavemente es cuando se está llenando algún LL, por lo que en esta zona el potencial no varía mucho.

La Fig. (3.2) se ajusta perfectamente a esta descripción, las dos líneas verticales de la izquierda muestran los límites de una región con $\nu = 6$ mientras que las dos líneas verticales derechas muestran los límites de una región sin plateaus. En las regiones donde existen plateaus (un nivel de LL está lleno) es donde el potencial de Hartree tiene mayor variación, el sistema prefiere permitir un aumento en el potencial antes de llenar otro LL. En las regiones donde el factor de llenado cambia suavemente corresponde a las regiones donde el potencial de Hartree se mantiene aproximadamente constante hasta que se llena por completo el LL. En otras palabras, el poder de apantallamiento de los electrones es pequeño en la región de los plateaus (como si el 2DEG fuese un aislante), pero es grande en las regiones entre plateaus (como si el 2DEG fuese un metal).

En este capítulo se decidió usar la DOS de la Ec. (1.17) (con deltas de Dirac) en lugar de la DOS de la Ec. (1.19) (con gaussianas) debido a que con la primera los cálculos numéricos son más sencillos y toman menos tiempo. En el rango de las temperaturas y campos magnéticos considerados, los resultados con las dos DOS

son casi iguales, no hay ninguna diferencia apreciable en el factor de llenado ni en el ancho de los plateaus. Aún así debe considerar que la DOS de la Ec. (1.17) presenta problemas a temperatura nula con campo magnético, pero en este trabajo nunca se resolvió dicho sistema.

3.3.2. Efectos del campo magnético

Para todos los cálculos en esta sección se considerará el ancho de la cinta Hall como $d = 50 a_0^* \simeq 500 \text{ nm} = 5000 \text{ \AA}$. La particularidad es que se resolvió el sistema para diferentes campos magnéticos ($B = 1.0, 1.4, 2.0, 3.0, 4.0, 5.0 \text{ T}$), ver la Fig. (1.3) para tener presente las energías características para estos casos.. Además la aproximación de TF supone que el potencial cambia lo suficientemente lento en el espacio (en una región del orden de la longitud magnética), lo que significa que tiene una mayor validez a medida que el campo magnético B es mayor ya que la longitud magnética va como $l_B \sim B^{-1/2}$.

Lo primero a considerar es que la energía $\hbar\omega_c$ es proporcional al campo magnético B , y que la degeneración N_ϕ también es proporcional a B como se muestra en la Ec. (1.16). Esto significa que si se aplica un mayor campo magnético los LL se separarán más entre sí y cada LL puede contener más electrones. El aumento de la degeneración significa que con un mayor campo magnético el factor de llenado deberá disminuir ya que necesita menos LL para distribuir los electrones. En la Fig. (3.3) se evidencia el decrecimiento del factor de llenado a medida que aumenta el campo magnético. Para el campo magnético más bajo (1.0 T) el llenado máximo en el centro de la cinta supera $\nu = 8$ mientras que para el campo mas alto (5.0 T) el llenado máximo es menor a $\nu = 2$ implicando que ningún LL se llenó. Note que la cantidad de electrones es igual en todos los cálculos, lo que varía es cuántos contiene cada LL.

La temperatura también es de importancia para ver la formación de plateaus, a medida que la temperatura baja estos son más notables mientras que a temperaturas altas se desdibujan por la acción de la distribución de Fermi-Dirac. A la temperatura de 8.4 K para ningún campo magnético aparecieron plateaus en el factor de llenado, mientras que a 2.0 K para todos los campos magnéticos aparecieron plateaus en el factor de llenado cada que este alcanza valores pares. Para el campo de 1.0 T hay plateaus en los valores de $\nu = 2, 4, 6, 8$; para el campo de 1.4 T hay plateaus en los valores de $\nu = 2, 4, 6$; para el campo de 2.0 T hay plateaus en los valores de $\nu = 2, 4$; para el campo de 3.0 T hay plateaus en los valores de $\nu = 2$; para el campo de 4.0 T hay plateaus en los valores de $\nu = 2$; mientras que para el campo de 5.0 T no hay ningún plateau ya que el llenado máximo es inferior a 2. Siguiendo la guía de la Fig. (1.3) se tiene que para temperatura de 2.0 K todos los campos magnéticos deben

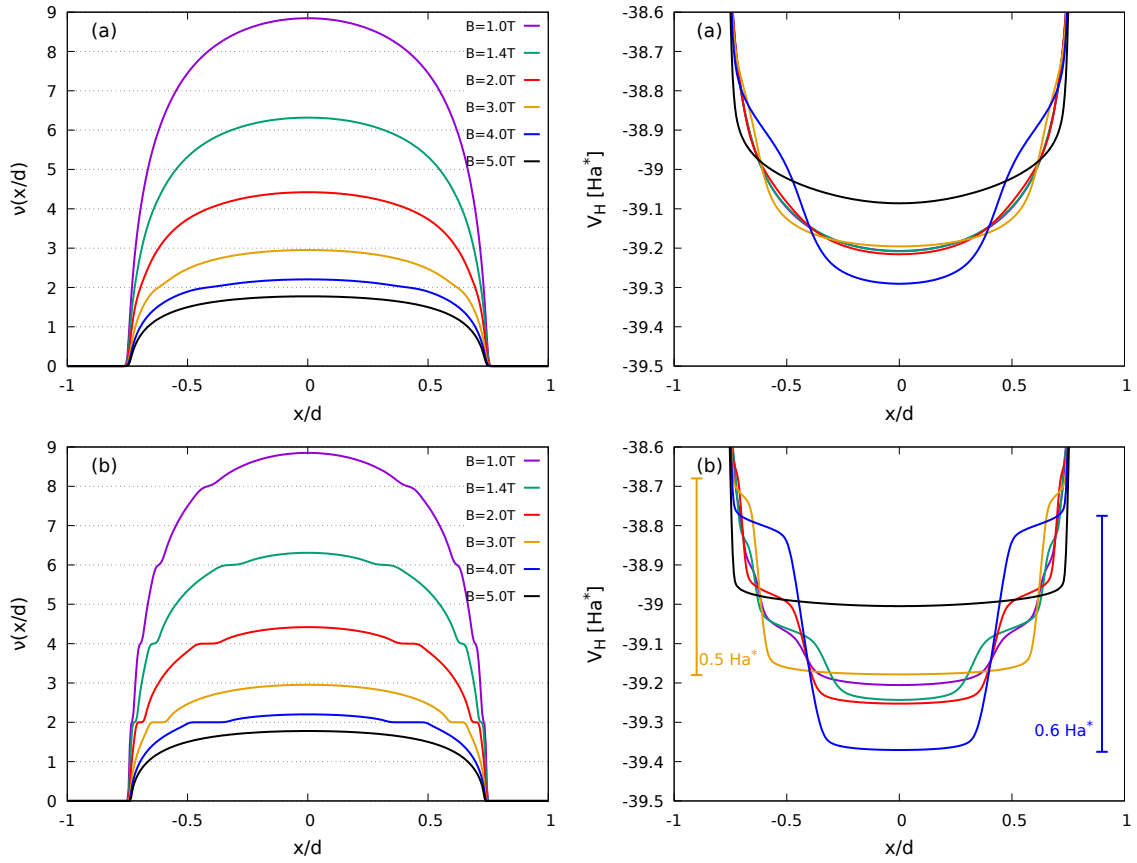


Figura 3.3: Factor de llenado $\nu(x)$ (columna izquierda) y potencial de Hartree $V_H(x)$ (columna derecha) para $d = 50 a_0^*$ y diferentes campos magnéticos B . Las temperaturas son $T = 8.4$ K para (a) y $T = 2.0$ K para (b). En la gráfica de $V_H(x)$ a $T = 2.0$ K se muestran 2 líneas verticales, una para $B = 3$ T (amarilla) y otra para $B = 4$ T (azul), cuya longitud es igual a los saltos de potencial entre regiones de potencial constantes.

exhibir el comportamiento del IQHE, mientras que a 8.4 K sólo el campo de 5 T (el cual ni siquiera tiene plateaus) estaría en este régimen. El efecto de la temperatura es consistente.

Para todos los campos magnéticos los potenciales de Hartree tienen una profundidad similar de aproximadamente -39 Ha^* , el ancho de esta región es también similar. Además el potencial químico es similar también para todos los campos con un valor aproximado de -38.5 Ha^* . Esto causa que la región donde el potencial de Hartree es menor al potencial químico sea similar para todos los campos, causando que el factor de llenado empiece a crecer de forma significativa en las mismas regiones. Esto se evidencia en la Fig. (3.3) donde el factor de llenado se aparta de un valor nulo aproximadamente en el mismo punto para todos los campos magnéticos.

En la Fig. (3.3) a 2 K (con los plateaus formados) se evidencia en el potencial de Hartree las regiones de gran variación que corresponden a la misma región donde el factor de llenado tiene plateaus. En el potencial cuando el campo es 5 T no hay ningún salto de este tipo ya que no hay plateaus. En el potencial cuando el campo es 4 T hay un salto del orden de 0.6 Ha^* (ver potenciales de la Fig. (3.3(b))), que coincide

con la energía $\hbar\omega_c \sim 0.6 \text{ Ha}^*$ para este campo magnético, es exactamente la energía que le cuesta al sistema empezar a llenar un nuevo LL. Para el potencial con campo de 3 T el salto de 0.5 Ha^* (ver potenciales de la Fig. (3.3b.)) coincide también con la energía $\hbar\omega_c \sim 0.47 \text{ Ha}^*$ de este campo. Para el campo de 2 T se tiene $\hbar\omega_c \sim 0.3 \text{ Ha}^*$, para 1.4 T se tiene $\hbar\omega_c \sim 0.2 \text{ Ha}^*$ y para 1 T se tiene $\hbar\omega_c \sim 0.15 \text{ Ha}^*$. Todos estos valores coinciden con los saltos en el potencial de Hartree en las regiones donde hay plateaus tal como se esperaba. En la gráfica a 8.4 K no hay estas variaciones ya que la temperatura no ha dejado que se formen plateaus.

Los potenciales en la Fig. (3.3) parecen no tener un orden con respecto al campo magnético B , sin embargo tiene que ver con cuantos saltos y de cuanta profundidad hay en el potencial. El potencial para $B = 5 \text{ T}$ es el menos profundo debido a que no completa ningún LL y por ende no tiene saltos. El potencial para $B = 4 \text{ T}$ es el más profundo de todos gracias al salto de llenar un LL. Para $B = 3 \text{ T}$ se tiene el segundo potencial menos profundo con un sólo salto, es superado en profundidad por los potenciales con $B = 2 \text{ T}$ (2 saltos), $B = 1.4 \text{ T}$ (3 saltos) y $B = 1 \text{ T}$ (4 saltos) ya que estos tienen más saltos en el potencial. Si se compara los casos de $B = 2 \text{ T}$ y $B = 1.4 \text{ T}$, el primero es más profundo ya que los saltos son mayores aunque solamente tenga 2. Sucede igual si se compara los casos de $B = 1.4 \text{ T}$ y $B = 1 \text{ T}$, donde más saltos compensan el que sean de menor energía. Note que para entender el orden de la profundidad de los potenciales de Hartree V_H es necesario tener en cuenta tanto el número de saltos que tienen como de cuanto es el salto, ambos parámetros determinaran la profundidad máxima.

3.3.3. Comparación de ancho de cinta

Para todos los cálculos en esta sección se considerará un campo magnético de $B = 1.4 \text{ T}$. La particularidad es que se resolvió el sistema para diferentes anchos d de cinta Hall ($d = 1, 5, 10, 25, 50, 100 a_0^*$). Además la aproximación de TF supone que el potencial cambia lo suficientemente lento en el espacio, lo que significa que tiene una mayor validez a medida que el ancho d de la cinta Hall es mayor ($d/l_B \gtrsim 1$).

El potencial de Hartree V_H es proporcional al ancho d de la cinta Hall. Esto significa que mientras mayor sea el ancho de la cinta Hall, mayor va a ser la profundidad del potencial. En la Fig. (3.4) se puede notar como aumenta la profundidad de V_H cuando aumenta el ancho d , cuando $d = 100 a_0^*$ el fondo del potencial es del orden de -78 Ha^* , mientras que para $d = a_0^*$ el fondo del potencial es del orden de -0.9 Ha^* . Cuando aumenta la profundidad del potencial se favorece que los electrones se acumulen en el centro de la cinta, en la Fig. (3.4) se evidencia cómo el aumento del ancho de la cinta hall causa que el factor de llenado se localice más al centro. Con el ancho $d = a_0^*$ el factor de llenado se ve más extendido a los bordes y por ende

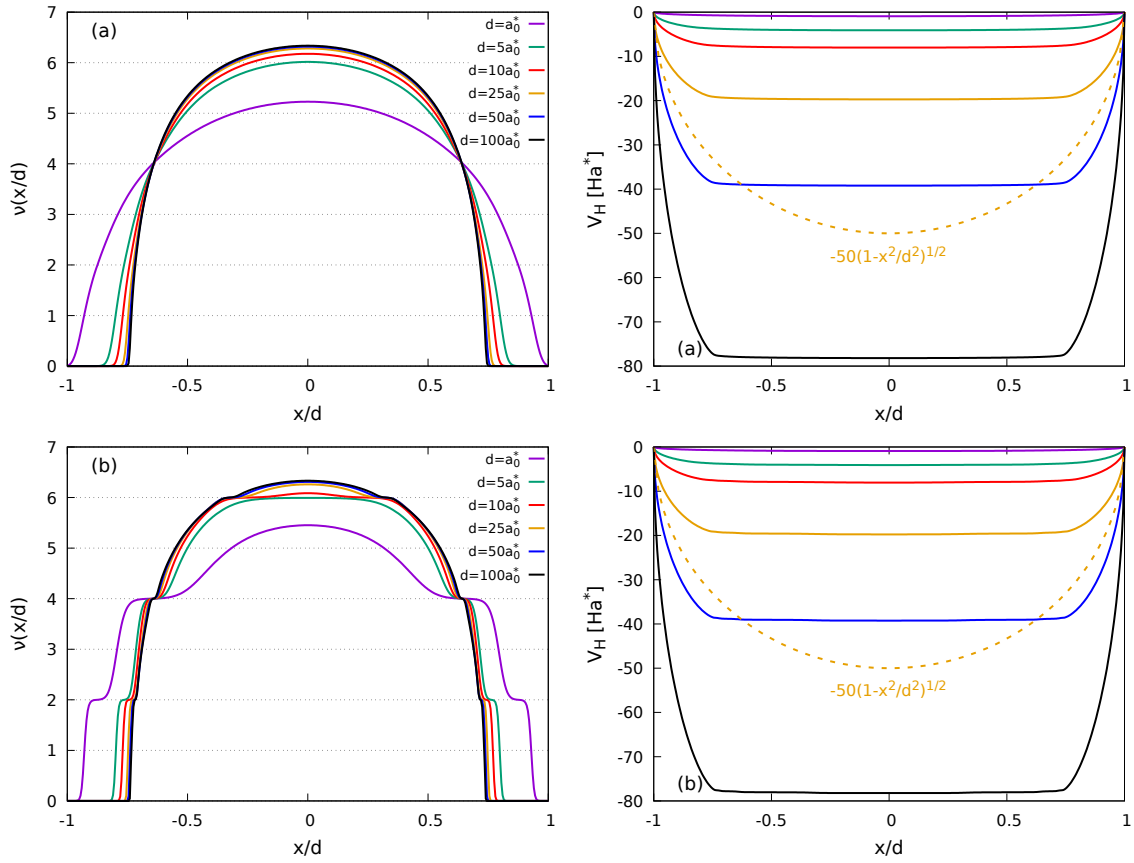


Figura 3.4: Factor de llenado $\nu(x)$ (columna izquierda) y potencial de Hartree $V_H(x)$ (columna derecha) para $B = 1.4$ T y diferentes anchos d de cinta Hall. Las temperaturas son $T = 8.4$ K para (a) y $T = 2.0$ K para (b). La línea a trazos corresponde al potencial electrostático generado por las cargas positivas uniformemente distribuidas $V_0(x)$ mostrado en la Ec. (3.14) para $d = 25 a_0^*$.

alcanza un menor valor en el centro de la cinta. A medida que se aumenta d el factor de llenado se localiza más en el centro causando que el llenado en el centro también sea mas alto. Note que el área bajo el factor de llenado para todos los d es igual, ya que la cantidad de electrones es fija y la degeneración de los LL también es igual.

El efecto de la temperatura es consistente, a 8.4 K no se observan plateaus mientras que a 2 K aparecen en los llenados pares para todos los valores de d . En la Fig. (3.4) para los potenciales de Hartree a 2 K no se aprecia la misma textura descrita anteriormente (variaciones grandes en las regiones con plateaus y variaciones pequeñas en las regiones entre plateaus), esto se debe a la escala en la que se están graficando. Note que con un ajuste de escala vertical para cada potencial de Hartree se podrá observar esta textura como en la Fig. (3.2) y la Fig. (3.3). Con la guía de la Fig. (1.3) se observa que a 2.0 K los sistemas están en el régimen del IQHE, mientras que a 8.4 K la energía térmica es lo suficientemente alta para no dejar que se formen plateaus, lo cual se observa exactamente en la Fig. (3.4).

De nuevo se puede ver la Fig. (1.3) para evidenciar que en la temperatura alta domina la energía térmica y a la temperatura baja la energía de ciclotrón.

Además se tiene que los resultados entre los caso $d = 100 a_0^*$ y $d = 50 a_0^*$ son bastante similares, indicando que se encuentran cerca de un límite para valores d muy grande. Esto nos indica que la sola existencia de bordes en el sistema es importante para la forma que tendrá la densidad electrónica $n_s(x)$ en este límite.

Las gráficas para potencial de Hartree también muestran una curva para el potencial electrostático generado por las cargas positivas uniformemente distribuidas $V_0(x)$ según la Ec. (3.14), con ancho $d = 25 a_0^*$. Si se comparan el potencial de Hartree $V_H(x)$ y el potencial $V_0(x)$ para este ancho d , es claro como la presencia de electrones reduce la profundidad del potencial y vuelve relativamente constante al fondo del mismo. Este efecto es conocido como el apantallamiento o 'screening' por los electrones itinerantes. Note que el efecto es muy relevante cuantitativamente (varios meV), especialmente en la región central de la cinta.

3.3.4. Comparación entre resultados numéricos con límite analítico

Se considera la misma geometría de la cinta Hall, pero ahora se emplea un resultado analítico para temperatura nula ($T = 0$) y sin campo magnético ($B = 0$). Debido a que no hay campo ni temperatura se debe considerar la DOS de la Ec. (1.5), además que en el límite de temperatura nula la distribución de Fermi-Dirac se transforma en funciones escalón. En estas condiciones, la densidad de electrones $n_x(x)$ está dada por un potencial Hartree de la forma [23]

$$n_s(x) = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} (E_F - V_H(x)) \theta(E_F - V_H(x)), \quad (3.22)$$

donde E_F es el potencial químico a $T = 0$ y $\theta(x)$ es la función escalón. Ya que no hay temperatura la energía de Fermi determina qué regiones pueden ser ocupadas por los electrones. Sea $(-b, b)$ la región donde el potencial de Hartree está por debajo del nivel de Fermi, es esta región en la que pueden acumularse los electrones. Es decir que para $x > |b|$ la densidad electrónica es estrictamente nula. Este intervalo es simétrico ya que los voltajes en las compuestas metálicas son iguales ($V_L = V_R = 0$).

Dado una relación fija entre la cantidad de cargas negativas y positivas (\bar{n}/n_0), y el ancho de la cinta Hall (d), el valor de b tiene que estar definido de forma única. Por ejemplo, si se fija $\bar{n}/n_0 = 0.458$ y $d = 50 a_0^*$ se tiene que $b \simeq 0.73 d$. La utilidad de considerar el caso con temperatura y campo magnético nulo es que existe una expresión analítica para la densidad electrónica para el límite de d muy grande, la cual es [23]

$$n_s^0(x) = n_0 \sqrt{\frac{b^2 - x^2}{d^2 - x^2}}. \quad (3.23)$$

Usando la Ec. (3.23) en la Ec. (3.2) se llega a

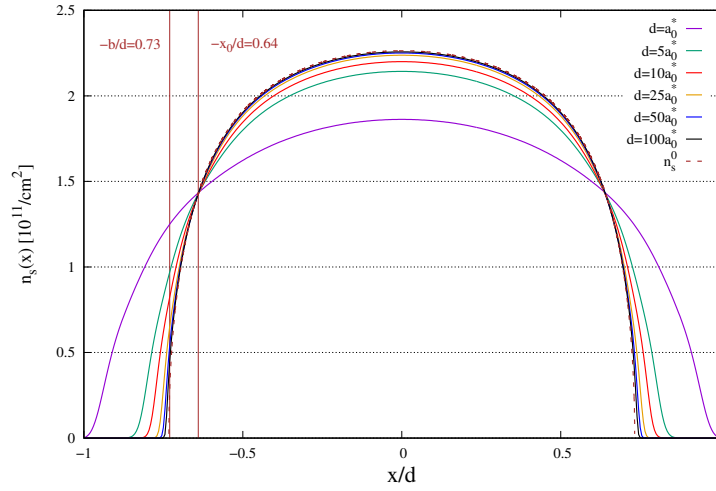


Figura 3.5: Densidad electrónica $n_s(x)$ para $B = 1.4$ T, $T = 8.4$ K y diferentes anchos d de cinta Hall. La densidad $n_s^0(x)$ para $B = 0$, $T = 0$ y en el límite de d muy grande se muestra con la línea de trazos. La línea vertical de la izquierda señala donde la densidad $n_s(x)$ deja de ser nula ($-b/d$). La línea vertical derecha señala el punto x_0/d donde la densidad analítica es igual a la densidad promedio ($\bar{n} = n_s^0(x_0)$).

$$\frac{\bar{n}}{n_0} = \frac{b}{d} E \left[\arcsin \left(\frac{b}{d} \right), \frac{d^2}{b^2} \right], \quad (3.24)$$

donde $E(x, y)$ es una integral elíptica incompleta del segundo tipo [35]. Si se resuelve numéricamente la ecuación para $\bar{n}/n_0 = 0.458$ se tiene que $b/d \simeq 0.73$.

Otra buena pregunta es para que x_0 se cumple la igualdad $\bar{n} = n_s^0(x_0)$, que según la Ec. (3.23) es cuando

$$\left(\frac{x_0}{d} \right)^2 = \frac{(b/d)^2 - (\bar{n}/n_0)^2}{1 - (\bar{n}/n_0)^2}. \quad (3.25)$$

Entonces la igualdad $\bar{n} = n_s^0(x_0)$ para $\bar{n}/n_0 = 0.458$ se cumple cuando $x_0/d = 0.64$.

Los valores de b y x_0 serán diferentes para sistemas con temperatura finita, campo magnético y un ancho d no tan grande, aún así no deberían variar mucho por lo que pueden ser un buen indicador de que los cálculos numéricos realizados son correctos. En la Fig. (3.5) se muestra las densidades electrónicas $n_s(x)$ calculadas para campo magnético $B = 1.4$ T, temperatura $T = 8.4$ K y diferentes anchos d de cinta Hall, además se muestra la densidad $n_s^0(x)$ que tiene una expresión analítica. Es una buena temperatura para comparar ya que no todavía no se han formado plateaus que tienen una relación directa con el campo magnético aplicado.

Lo primero que se nota es como el ancho de la cinta Hall influye en la región donde la densidad toma valores no nulos. Las densidades con $d = 50 a_0^*$ y $d = 100 a_0^*$ ocupan regiones muy similares a la densidad $n_s^0(x)$. Por el contrario el caso de $d = a_0^*$ ocupa una región bastante más amplia debido a que esta fuera del límite de un ancho d grande. Claramente el valor de $b/d \simeq 0.73$ es consistente con los resultados

analíticos obtenidos para la densidad con campo y temperatura nulos.

La Fig. (3.5) también tiene la particularidad de que todas las densidad parecen cruzarse en un mismo punto. Este punto coincide con $x_0/d = 0.64$ que es cuando la densidad electrónica del caso de temperatura y campo nulos iguala a la densidad promedio ($\bar{n} = n_s^0(x_0)$). El cruce no es exacto debido a los efectos de temperatura y campo magnético, pero es un excelente indicador que los resultados obtenidos son correctos. Además note que en este punto se invierten el orden de las densidades, es decir que en los bordes las densidades son más altas para d menores y en el centro las densidades son más altas para d mayores.

Comparando con los cálculos con temperatura y campo magnético, y el caso de temperatura y campo nulo con expresión analítica $n_s^0(x)$, se concluye que ambos resultados son consistentes.

3.4. Inclusión del término de Zeeman

Si se compara la energía de ciclotrón ($\hbar\omega_c = \hbar eB/m^*c$) con la energía del término de Zeeman ($\Delta E_z = -\sigma|g|\mu_B B/2$), se tiene que $\hbar\omega_c/|\Delta E_z| = 4m_0/|g|m^*$ es independiente del campo magnético B . Para el semiconductor *GaAs* el valor es de $\hbar\omega_c/|\Delta E_z| \simeq 136$. Ya que la energía de ciclotrón es 136 veces más grande que la energía de Zeeman se puede considerar una buena aproximación los cálculos que se han hecho hasta ahora. Cuando se introduce el término de Zeeman en la aproximación de Hartree se consideran las autoenergías de la forma en la Ec. (1.15), por lo que la DOS se escribe como

$$g(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi l_B^2} \sum_{\sigma} \sum_{n=0}^{\infty} \delta \left[\varepsilon - \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + \sigma \frac{|g|\mu_B B}{2} \right]. \quad (3.26)$$

Por lo tanto la densidad electrónica para un espín σ será

$$n_s^{\sigma}(x) = \frac{1}{2\pi l_B^2} \sum_{n=0}^{\infty} f_{FD} \left[\left(\hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) - \sigma \frac{|g|\mu_B B}{2} + V_H(x) - \mu \right) / k_B T \right]. \quad (3.27)$$

Note que la densidad electrónica total es $n_s(x) = n_s^{\uparrow}(x) + n_s^{\downarrow}(x)$. El factor de llenado de un espín σ está dado por $\nu^{\sigma}(x) = 2\pi l_B^2 n_s^{\sigma}(x)$

En la Fig. (3.6) se muestran los factores de llenado para cada espín y el total considerando el término de Zeeman, y además el factor de llenado del caso donde no se considera el término de Zeeman. El incluir este término aporta muy poco, la densidad electrónica no cambia de forma significativa y la aparición de plateaus sigue siendo sólo en valores pares del factor de llenado. Note que los factores de

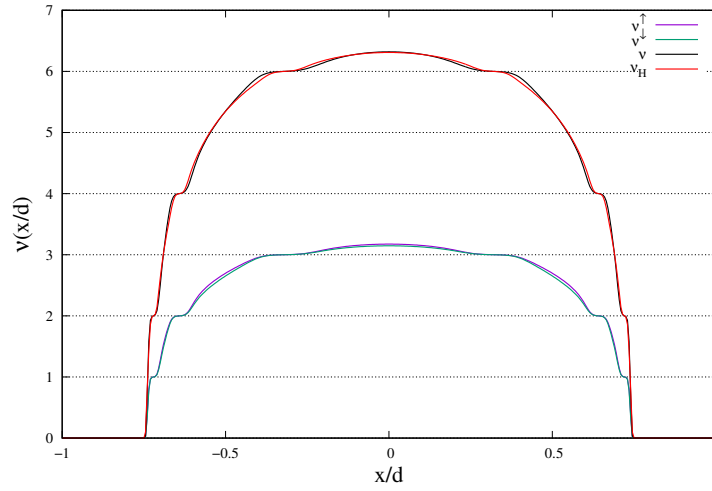


Figura 3.6: Factor de llenado con espín \uparrow considerando el término de Zeeman ($\nu^\uparrow(x)$, línea violeta), factor de llenado con espín \downarrow considerando el término de Zeeman ($\nu^\downarrow(x)$, línea verde), factor de llenado total considerando el término de Zeeman ($\nu(x)$, línea negra) y factor de llenado sin considerar el término de Zeeman ($\nu_H(x) = \nu^\uparrow(x) + \nu^\downarrow(x)$, línea roja) para $B = 1.4$ T, $d = 50 a_0^*$ y $T = 2.0$ K.

llenado de espín $\nu^\sigma(x)$ tienen plateaus en todos los enteros (se llena un LL para el espín σ), pero al ser casi iguales el factor de llenado total $\nu(x)$ presenta plateaus sólo en valores pares tal como se describió anteriormente.

Con la inclusión del término de Zeeman los LL tienen diferentes energías dependiendo del espín, siendo el espín \uparrow el de menor energía. En la Fig. (3.6) se ven regiones entre plateaus donde el factor de llenado $\nu^\uparrow(x)$ toma valores mayores al factor de llenado $\nu^\downarrow(x)$, lo cual se espera por la diferencia de energías según el espín. Al ser tan pequeña la energía de Zeeman en comparación con la energía de ciclotrón hace que la inclusión de este término Zeeman no produzca cambios significativos. Para obtener una verdadera diferencia entre los factores de llenado dependientes del espín es necesario introducir otros elementos como por ejemplo el efecto del intercambio entre los electrones, que se discute en el siguiente capítulo.

Capítulo 4

Efectos de la interacción de intercambio

4.1. Aproximación de Thomas-Fermi dependiente del espín

En el Cap. (3) sólo se consideró el potencial de Hartree para calcular la densidad electrónica de la cinta Hall, el siguiente paso es la inclusión del potencial de intercambio V_x^σ del 2DEG como se lo definió en la Ec. (2.31). Ya que el potencial de intercambio depende del espín σ , es conveniente trabajar con las densidades electrónicas para cada espín $n_s^\sigma(x)$ en lugar de la densidad total. De esta forma la Ec. (2.43) se ve modificada a

$$n_s(x) = n_s^\uparrow(x) + n_s^\downarrow(x), \quad (4.1)$$

y la densidad para cada espín es de la forma

$$n_s^\sigma(x) = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon g^\sigma(\varepsilon) f_{FD} [(\varepsilon + V_H(x) + V_x^\sigma(x) - \mu) / k_B T], \quad (4.2)$$

donde $g^\sigma(\varepsilon)$ es la densidad de estados con espín σ . Para la DOS se considerará la Ec. (1.19) donde se tiene en cuenta el ensanchamiento Γ de cada nivel de Landau, además de que para cada LL se tomará la energía de la Ec. (1.15) donde se tiene en cuenta el término de Zeeman. La razón de escoger esta DOS es porque su descripción física de la realidad es más adecuada ya que toda muestra tiene alguna cantidad de impurezas e imperfecciones.

Con estas consideraciones la densidad de estados con espín σ se escribe como

$$g^\sigma(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi l_m^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi} \Gamma} \exp \left[-\frac{\left(\varepsilon - \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + \sigma \frac{|g|\mu_B B}{2} \right)^2}{2\Gamma^2} \right]. \quad (4.3)$$

Note que $g(\varepsilon) = g^\uparrow(\varepsilon) + g^\downarrow(\varepsilon)$. Reemplazando la Ec. (4.3) en la Ec. (4.2) se puede reescribir la densidad de electrones con espín σ como

$$n_s^\sigma(x) = \frac{1}{2\pi l_m^2} \frac{1}{\sqrt{2\pi} \Gamma} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left\{ f_{FD} \left(\frac{\varepsilon + V_H(x) + V_x^\sigma(x) - \mu}{k_B T} \right) \times \sum_{n=0}^{\infty} \exp \left[-\frac{\left(\varepsilon - \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + \sigma \frac{|g|\mu_B B}{2} \right)^2}{2\Gamma^2} \right] \right\}, \quad (4.4)$$

donde se tiene que el potencial V_H es el mismo de la Ec. (3.13). Además el sistema debe cumplir la condición establecida en la Ec. (3.2). En el capítulo anterior se consideró una DOS con distribuciones delta de Dirac, lo que condujo a que la expresión de la densidad electrónica sea una suma de funciones de Fermi-Dirac. Ahora con una DOS compuesta de gaussianas es necesario resolver una integral para calcular la densidad electrónica. Esta integral es una complicación importante a la hora de resolver el problema usando métodos numéricos. Los factores de llenado para cada espín σ son

$$\nu^\sigma(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \Gamma} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left\{ f_{FD} \left(\frac{\varepsilon + V_H(x) + V_x^\sigma(x) - \mu}{k_B T} \right) \times \sum_{n=0}^{\infty} \exp \left[-\frac{\left(\varepsilon - \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + \sigma \frac{|g|\mu_B B}{2} \right)^2}{2\Gamma^2} \right] \right\}. \quad (4.5)$$

Con respecto al potencial de intercambio, una razonable primera aproximación es la de densidad local de espín (LSDA), cuya expresión para 2D está en la Ec. (2.37). Usando esta aproximación y considerando la permitividad eléctrica del material ϵ , se puede escribir el término del potencial de intercambio como

$$V_x^\sigma(x) = -4 \frac{e^2}{\epsilon} \left[\frac{1}{\pi} n_s^\sigma(x) \right]^{1/2}. \quad (4.6)$$

Las Eqs. (3.2), (3.13), (4.2) y (4.6) forman un conjunto de ecuaciones autoconsistentes que dan una solución única para el sistema $\{n_s^\sigma(x), V_H(x), V_x^\sigma(x), \mu\}$. La unidad de energía más natural para los potenciales es la del Hartree efectivo (Ha^*), por lo que se define un potencial de Hartree adimensional $\widetilde{V}_H(x) = V_H(x)/\text{Ha}^*$ y un potencial de intercambio adimensional $\widetilde{V}_x^\sigma(x) = V_x^\sigma(x)/\text{Ha}^*$. De forma equivalente se define una densidad electrónica de espín σ adimensional el radio de Bohr efecti-

vo (a_0^*) tal que $\widetilde{n}_s^\sigma(x) = a_0^{*2} n_s^\sigma(x)$. Además se introduce un parámetro adimensional $r_0^2 = 1/\pi a_0^{*2} n_0$ para caracterizar la densidad de carga positiva. Con estas consideraciones se puede reescribir las cuatro ecuaciones autoconsistentes como

$$\begin{aligned} \widetilde{n}_s^\sigma(x) = & \frac{a_0^{*2}}{2\pi l_m^2 \sqrt{2\pi} \Gamma} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left\{ f_{FD} \left(\frac{\varepsilon + V_H(x) + V_x^\sigma(x) - \mu}{k_B T} \right) \times \right. \\ & \left. \sum_{n=0}^{\infty} \exp \left[- \frac{\left(\varepsilon - \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + \sigma \frac{|g|\mu_B B}{2} \right)^2}{2\Gamma^2} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.7)$$

$$\widetilde{V}_H(x) = -\frac{2d}{a_0^*} \frac{1}{r_0^2} \sqrt{1 - \frac{x^2}{d^2}} + \frac{2d}{a_0^*} \int_{-1}^1 dt \widetilde{n}_s(td) \ln \left| \frac{\sqrt{(1 - x^2/d^2)(1 - t^2)} + 1 - xt/d}{x/d - t} \right|, \quad (4.8)$$

$$\widetilde{V}_x^\sigma(x) = -\frac{4}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\widetilde{n}_s^\sigma(x)} \quad (4.9)$$

$$\frac{\bar{n}}{n_0} = \frac{\pi r_0^2}{2} \int_{-1}^1 dx \widetilde{n}_s(xd). \quad (4.10)$$

4.2. Resultados numéricos

4.2.1. Consideraciones generales

Los parámetros se consideran igual al caso sin intercambio, es decir $\bar{n}/n_0 = 0.458$, $r_0 = 1$ y todas las demás constantes del material semiconductor *GaAs*. Además se tomó como parámetro $\Gamma = 0.01$ meV que caracteriza el ancho de las gaussianas en la DOS [36]. Las ecuaciones fueron resueltas numéricamente para sistemas con diferentes campos magnéticos B y anchos d de cinta Hall. Se espera ver como cambia el factor de llenado por la inclusión del intercambio, particularmente en sus valores enteros impares.

Un ejemplo se muestra en la Fig. (4.1) donde claramente se aprecia la relevancia del espín, además que se tiene plateaus tanto para valores pares como para valores impares. El término de energía de Zeeman causa que los LL tengan diferentes energía dependiendo de su espín, pero a esto se adiciona ahora el potencial de intercambio de tal forma que aparecen plateaus en llenados impares del factor de llenado.

En la Fig. (4.1) se aprecia como los LL se llenan en el orden esperado debido a la energía de cada uno. En los extremos empieza a llenarse el primer LL con espín \uparrow , una vez que se llena empieza a llenarse el primer LL con espín \downarrow (se aprecia en el zoom de la gráfica). El siguiente nivel en llenarse será el segundo LL con espín \uparrow y

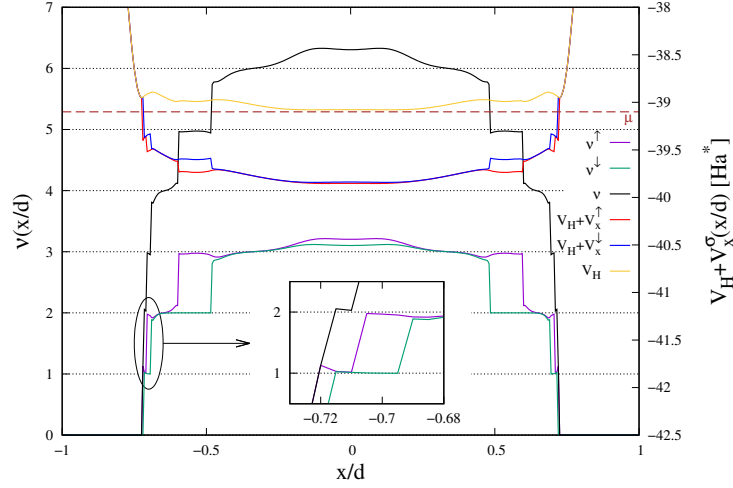


Figura 4.1: Factores de llenado dependientes del espín $\nu^\sigma(x)$ y factor de llenado total $\nu(x)$, potencial de Hartree $V_H(x)$ y potencial de Hartree junto a los potenciales de intercambio $V_H(x) + V_x^\sigma(x)$, para $B = 1.4 \text{ T}$, $d = 50 a_0^*$ y $T = 2.67 \text{ K}$. La escala para los factores de llenado está en el eje izquierdo y para los potenciales en el eje derecho. La línea de trazos describe el potencial químico μ del sistema.

seguirán sucesivamente. Por ejemplo, un factor de llenado de cinco corresponde a tres LL con espín \uparrow y dos con espín \downarrow en el orden $(1 \uparrow, 1 \downarrow, 2 \uparrow, 2 \downarrow, 3 \uparrow)$.

La Fig. (4.1) muestra plateaus en todos los factores de llenados enteros menos en $\nu = 1$. Esto se debe a que para resolver el problema de forma numérica se discretizó el espacio, en el zoom claramente se aprecia como se llena el LL de espín \uparrow antes que el LL de espín \downarrow , sin embargo no hay puntos intermedios para apreciar claramente este plateau. Además es notorio como los plateaus se vuelven más anchos a medida que toman factores de llenado más altos: esto se debe a que en el centro de la cinta $n_s^\uparrow(x)$ y $n_s^\downarrow(x)$ varían más suavemente y favorecen la formación de los plateaus. Note que la inclusión del potencial de intercambio causa que los factores de llenado $\nu^\uparrow(x)$ y $\nu^\downarrow(x)$ sean significativamente diferentes.

Nuevamente se tiene que los electrones se acumulan en el centro de la cinta debido a que los potenciales son más profundos en esa región, es decir que en la región del centro de la cinta es donde el factor de llenado alcanza los mayores valores. Además las gráficas son totalmente simétricas debido a que los voltajes de las compuertas metálicas son $V_L = V_R = 0$, la simetría no se impuso en los cálculos numéricos, sino que resultó naturalmente de los mismos. Una densidad electrónica $n_s^\sigma(x)$ está determinada por el término $V_H(x) + V_x^\sigma(x)$, es decir que para entender el comportamiento del sistema es necesario describirlo teniendo en cuenta los dos potenciales a la vez, no solamente el potencial de Hartree V_H o el potencial de intercambio V_x^σ por separado. Note que en este ejemplo la profundidad del potencial del Hartree en su zona central es de $\sim 40 \text{ Ha}^*$, mientras que la del potencial de intercambio es del orden de $\sim 1 \text{ Ha}^*$. Sin embargo en la región central de la cinta (donde el factor de

llenado toma valores relevantes) el potencial de Hartree es bastante plano mientras que el potencial de intercambio tiene una mayor variación y textura en esa misma región. Esto causa que si bien el potencial de Hartree es bastante más profundo, es el potencial de intercambio el que toma una mayor influencia en la forma que tomará el factor de llenado. Una vez en la región central el potencial de Hartree tiene pequeñas variaciones del orden de $\sim 0.1 \text{ Ha}^*$, mientras que en esta región el potencial de intercambio aporta con variaciones del orden de $\sim 1 \text{ Ha}^*$. El potencial químico está alrededor de $\sim -39.1 \text{ Ha}^*$, y su intersección con los potenciales $V_H(x) + V_x^\sigma(x)$ da un buen parámetro de la región espacial donde los electrones se acumulan, lo cual se debe a la importancia de estos dos términos aunque se debe considerar efectos de la temperatura y de la energía $\hbar\omega_c$. Note que el potencial químico está por debajo del potencial de Hartree, lo que implica que el potencial de intercambio es decisivo para la región de localización de los electrones.

Se debe notar que los plateaus impares en $\nu(x)$ aparecen en las mismas regiones donde el potencial $V_H(x) + V_x^\sigma(x)$ tiene plateaus, el ejemplo más claro son los plateaus cuando $\nu = 3$ y $\nu = 5$. Esto se debe a que la textura de $V_H(x) + V_x^\sigma(x)$ está dada principalmente por el potencial de intercambio, el cual está dado por una expresión $V_x^\sigma(x) \sim \sqrt{n_s^\sigma(x)}$ debido al uso de la aproximación LSDA. En caso de usar otra expresión más elaborada para el potencial de intercambio se tendría una diferente correlación entre la forma del potencial y la forma del factor de llenado, aunque los plateaus impares en $\nu(x)$ tendrían que sobrevivir.

4.2.2. Efectos del campo magnético

Para todos los cálculos en esta sección se considerará el ancho de la cinta Hall como $d = 50 a_0^* \simeq 500 \text{ nm} = 5000 \text{ \AA}$. Se resolvió el sistema para diferentes campos magnéticos ($B = 1.0, 1.4, 2.0, 3.0 \text{ T}$). La longitud magnética más grande (menor validez de la aproximación de TF) se tiene cuando el campo es $B = 1 \text{ T}$, y es $l_B \simeq 26 \text{ nm} = 260 \text{ \AA}$, si se lo compara con el radio efectivo de Bohr se tiene $l_B/a_0^* \simeq 2.6$, por lo que el ancho $d = 50 a_0^*$ es suficientemente grande.

La degeneración por unidad de área de un LL para $B = 1 \text{ T}$ es de $n_\phi = 2.3 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, y si se la compara con el radio efectivo de Bohr se tiene $n_\phi a_0^{*2} = 0.02$. Para el campo de $B = 3 \text{ T}$ los valores son $n_\phi = 7.0 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ y $n_\phi a_0^{*2} = 0.07$. Es así que al aumentar la degeneración de cada LL se necesitan menos niveles para distribuir todos los electrones. La Fig. (4.2) y la Fig. (3.3) son consistentes con este argumento, para el campo magnético más bajo ($B = 1.0 \text{ T}$) el llenado máximo supera $\nu = 8$, mientras que para el campo más alto (3.0 T) el llenado máximo es de $\nu = 3$. Además este resultado es consistente con los resultados del Cap. (3), es decir que los valores para los llenados son aproximadamente los mismos para todos los diferentes

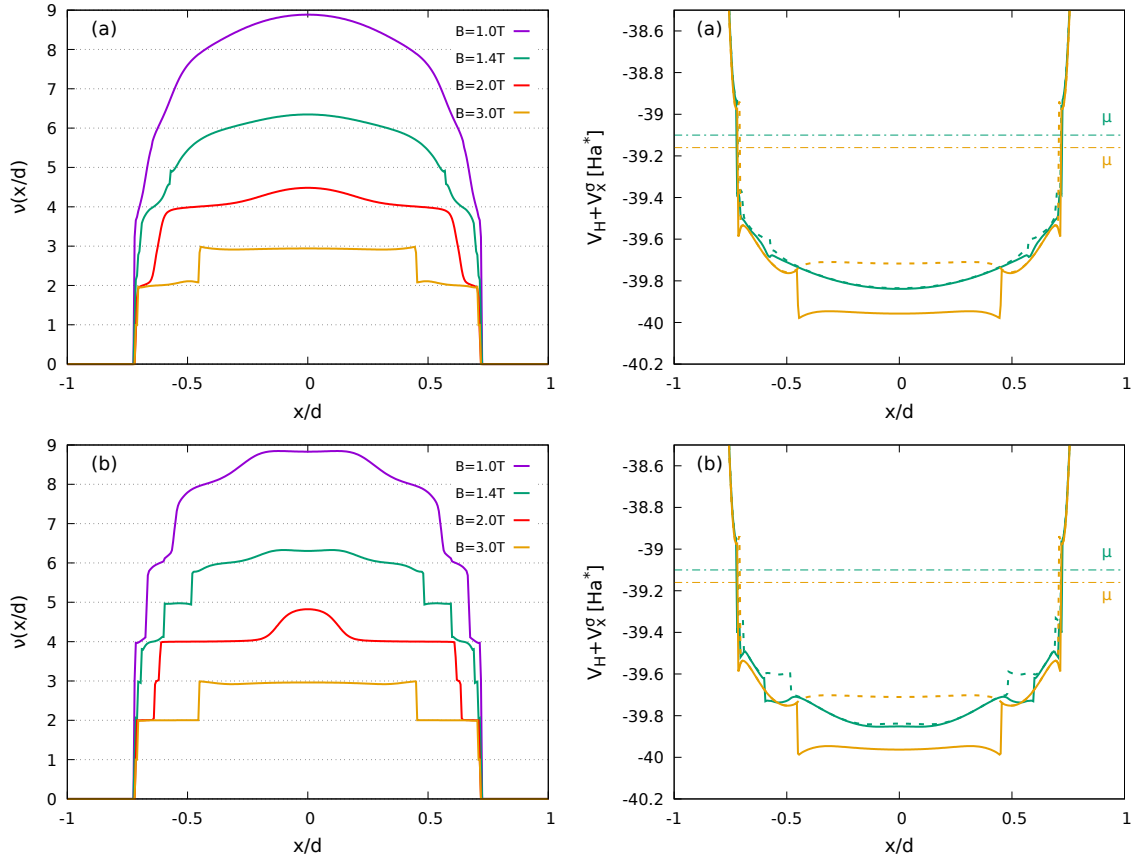


Figura 4.2: Factores de llenado total $\nu(x)$ (columna izquierda), potencial de Hartree junto a los potenciales de intercambio $V_H(x) + V_x^\sigma(x)$ y potencial químico μ (columna derecha) para $d = 50 a_0^*$ y diferentes campos magnéticos B . Los potenciales $V_H(x) + V_x^\uparrow(x)$ se representan con una línea sólida, los potenciales $V_H(x) + V_x^\downarrow(x)$ y el potencial químico μ con una línea de punto y trazo. Las temperaturas son $T = 4.75$ K para (a) y $T = 2.67$ K para (b).

campos magnéticos.

La temperatura es de importancia para la formación de plateaus, con temperaturas más bajas éstos son mas notables pero a temperaturas altas se desdibujan por la acción de la distribución de Fermi-Dirac. A la temperatura de 4.75 K se aprecian plateaus para $\nu = 2$ y 3 para el campo magnético de 3.0 T (que corresponde a 3 LL llenos, 2 con espín \uparrow y 1 con espín \downarrow), para el campo de 2.0 T se empiezan a formar los plateaus pero aún no son claros, para el resto de campos no se aprecian plateaus. En la temperatura de 2.67 K todos los campos excepto el de 1.0 T muestran plateaus bien formados tanto para factores de llenado pares como impares, los demás campos muestra plateaus tanto para factores de llenado pares como impares. Para el campo 3.0 T se tienen plateaus en $\nu = 1, 2$ y 3; para el campo 2.0 T se tienen plateaus en $\nu = 2, 3$ y 4; para el campo 1.4 T se tienen plateaus en $\nu = 2, 3, 4, 5$ y 6; para el campo 1.0 T se aprecia la formación de plateaus a factores de llenado pares pero no están bien definidos.

En las regiones donde hay plateaus pares los potenciales $V_H(x) + V_x^\uparrow(x)$ y $V_H(x) + V_x^\downarrow(x)$ son iguales ya que los llenados ν^\uparrow y ν^\downarrow también son iguales, por lo que el

potencial de Hartree V_H es el de mayor relevancia en esta región. Como ha sido discutido en el capítulo anterior, en la región de plateaus pares se tienen variaciones importantes en los potenciales $V_H(x) + V_x^\sigma(x)$ (a cuales corresponden variaciones en V_H), que significa que el poder de apantallamiento de los electrones en esta región es pequeño. Estas variaciones son del orden de $\hbar\omega_c$ ya que es la energía necesaria para que el sistema empiece a llenar con electrones el siguiente nivel de Landau.

El origen de los plateaus impares es diferente y se debe al potencial de intercambio. En estas regiones el potencial de Hartree V_H se mantiene aproximadamente constante, los potenciales de intercambio también son relativamente constantes pero tienen valores diferentes entre sí. La Fig. (4.2) muestra como en las regiones de plateaus impares los potenciales $V_H(x) + V_x^\uparrow(x)$ y $V_H(x) + V_x^\downarrow(x)$ tienen una diferencia notoria. Recuerde que la interacción de intercambio favorece que los espines se orienten en una sola dirección [37], causando que los plateaus aparezcan debido a que hay más electrones con un espín $\sigma = \uparrow$ que electrones con un espín $\sigma = \downarrow$. Es el término de Zeeman el que favorece que se llene el nivel de Landau con espín $\sigma = \uparrow$ ($\varepsilon_n^\uparrow = \hbar\omega_c(n + 1/2) - |g|\mu_B B/2$) antes que el de espín $\sigma = \downarrow$ ($\varepsilon_n^\downarrow = \hbar\omega_c(n + 1/2) + |g|\mu_B B/2$). Pero recuerde que el término de Zeeman por si solo no da origen a plateaus impares, es decir que la interacción de intercambio junto al término de Zeeman son ambas las responsable de la aparición de plateaus en factores de llenado impares. La Fig. (4.2) muestra que la relación entre los factores de llenado y los potenciales son consistentes, además que se observa claramente su comportamiento cuando se forman plateaus.

Para todos los campos magnéticos los potenciales de $V_H(x) + V_x^\sigma(x)$ tienen una profundidad similar de aproximadamente -40 Ha^* , el ancho de esta región es también similar. Además el potencial químico es similar también para todos los campos con un valor aproximado de -39.1 Ha^* . Esto causa que la región donde el potencial de Hartree es menor al potencial químico sea similar para todos los campos, causando que el factor de llenado deje de ser nulo en las mismas regiones. Esto se evidencia en la Fig. (4.2) donde el factor de llenado se aparta de un valor nulo en el mismo punto aproximadamente para todos los campos magnéticos.

4.2.3. Comparación de ancho de cinta

Para todos los cálculos en esta sección se considerara un campo magnético de $B = 1.4 \text{ T}$. Se resolvió el sistema para diferentes anchos d de cinta Hall ($d = 1, 5, 10, 25, 50, 100 a_0^*$). Para este campo magnético la correspondiente longitud magnética es $l_B \simeq 22 \text{ nm} = 220 \text{ \AA}$, si se lo compara con el radio efectivo de Bohr se tiene $l_B/a_0^* \simeq 2.2$, lo que da una pauta de que los anchos más grandes ya pueden entrar en el límite para la aproximación de TF.

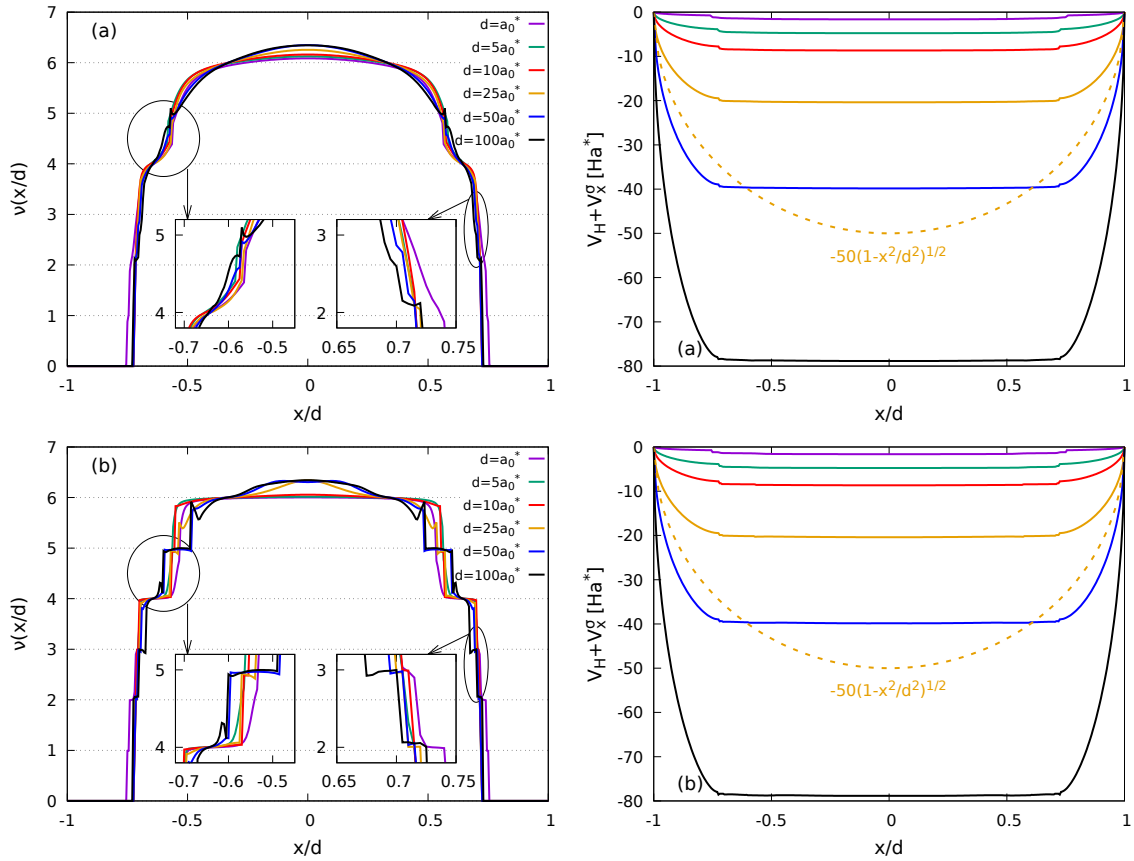


Figura 4.3: Factores de llenado total $\nu(x)$ (columna izquierda), potencial de Hartree junto a los potenciales de intercambio $V_H(x) + V_x^\sigma(x)$ (columna derecha) para $B = 1.4$ T y diferentes anchos d de cinta Hall. Las temperaturas son $T = 4.75$ K para (a) y $T = 2.67$ K para (b). La línea de trazos corresponde al potencial electrostático generado por las cargas positivas uniformemente distribuidas $V_0(x)$ mostrado en la Ec. (3.14) para $d = 25 a_0^*$.

Hay que considerar que la aproximación de TF supone que el potencial cambia lo suficientemente lento en el espacio, lo que significa que tiene una mayor validez a medida que el ancho d de la cinta Hall es mayor.

Ya que el potencial de Hartree V_H es proporcional al ancho d de la cinta Hall y que el potencial de Hartree es bastante más profundo que el potencial de intercambio V_x^σ (~ 1 Ha*), la profundidad de ambos potenciales sumados $V_H(x) + V_x^\sigma(x)$ debe ser muy parecida. Si se comparan las profundidades de los potenciales en la Fig. (3.4) (sólo se consideró Hartree) y en la Fig. (4.3) (se consideró Hartree e intercambio), se tiene que los resultados son consistentes. Es decir que si se comparan ambas gráficas para un mismo valor de d , ambas tienen potenciales con una profundidad similar. Es claro que el potencial de Hartree, y por ende el ancho d de la cinta, es el factor determinante para la profundidad del potencial total $V_H(x) + V_x^\sigma(x)$.

La mayor profundidad del potencial de Hartree en comparación con el potencial de intercambio hace que en la Fig. (4.3) para un mismo ancho d , no se pueda apreciar una diferencia entre los potenciales $V_H(x) + V_x^\uparrow(x)$ y $V_H(x) + V_x^\downarrow(x)$ graficados. Las diferencias entre los potenciales de intercambio para cada espín son pequeñas para

la escala de esta figura, pero esta diferencia sí se puede apreciar en la Fig. (4.1).

Una mayor profundidad del potencial favorece que los electrones se acumulen en el centro de la banda, en particular el potencial de intercambio es de gran relevancia en esta localización. La Fig. (4.3) muestra que cuanto mayor es el ancho, mayor es la localización de los electrones en el centro de la banda. Pero si uno compara la Fig. (3.4) y la Fig. (4.3) se muestra que la inclusión del potencial de intercambio ayuda a la localización. Cuando sólo se tiene en cuenta el potencial de Hartree, los electrones ocupan gran parte de la cinta para anchos pequeños ($d = a_0^*$); en contraste, en el caso con intercambio los electrones están mucho más localizados incluso para anchos pequeños. Esto se debe a que la adición del potencial de intercambio causa que el potencial total $V_H(x) + V_x^\sigma(x)$ tenga una región central más profunda que el resto del fondo de la banda, favoreciendo la localización de los electrones. En la Fig. (4.1) se ve claramente esta región que es donde el potencial de Hartree se diferencia del potencial total, es esta profundidad extra lo que permite una mayor localización que en el caso donde sólo se considera el potencial de Hartree.

El comportamiento de los plateaus también es de interés. La razón por la que los plateaus en los extremos de la cinta tienden a ser más pequeños (en algunos casos no se aprecian siquiera) es porque la variación de la densidad es muy grande, mientras que cerca del centro los plateaus se forman más fácilmente porque la variación de la densidad es más pequeña. Chklovskii, Shklovskii y Glazman establecen que el ancho de un plateau es mayor cuando la razón de cambio de la densidad es menor [24], que es consistente con los resultados obtenidos. Además la Fig. (4.3) muestra que los anchos de los plateaus impares tienden a ser más grande mientras mayor es el ancho d de la cinta, se puede ver en $\nu = 3$ y 5 . Por el contrario en los plateaus pares el ancho tiende a ser mayor cuando el ancho d de la cinta es más pequeño, se observa en $\nu = 4$ y 6 .

La Fig. (4.3) es consistente con el efecto de la temperatura. A 4.75 K se ve en algunas regiones que los plateaus están por formarse, pero a 2.67 K ya se aprecian los plateaus formados para factores de llenado tanto pares como impares. En los potenciales $V_H(x) + V_x^\sigma(x)$ no se aprecian las diferencias de temperatura debido a la escala, pero estas diferencias existen como se mostró en la Fig. (4.2) y la Fig. (4.1).

Las gráficas para potencial de Hartree también muestran una gráfica para el potencial electrostático generado por las cargas positivas uniformemente distribuidas $V_0(x)$ mostrado en la Ec. (3.14) con ancho $d = 25a_0^*$. Si se compara los potenciales $V_H(x) + V_x^\sigma(x)$ y el potencial $V_0(x)$ es claro cómo la presencia de electrones reduce la profundidad del potencial y vuelve relativamente plano al fondo de potencial, es el efecto de apantallamiento.

4.3. Comparación entre Hartree y Hartree con Intercambio

En el Cap. (3) se exploró el problema de la cinta Hall considerando sólo la interacción de Hartree, no se consideró el término de Zeeman y se usó una aproximación de TF, de forma similar a como lo hicieron Oh y Gerhardtts [23]. Con esas consideraciones se obtuvieron resultados que no alcanzan para explicar por completo el IQHE, ya que los plateaus aparecen sólo para factores de llenado pares. En este capítulo se consideró el término de Zeeman y se introdujo la interacción de intercambio usando la aproximación LSDA dando resultados significativamente diferentes. La Fig. (4.4) muestra los factores de llenado para el caso de Hartree y el caso de Hartree más Intercambio para diferentes campos magnéticos.

La primera y más importante diferencia es la aparición de plateaus para llenados impares cuando se incluye la interacción de intercambio. En el caso donde sólo se considera Hartree esto no se logró aún con el término de Zeeman, pero al introducir el término de intercambio este favorece que los electrones tomen un determinado espín gracias a lo cual aparecieron regiones con plateaus en llenados impares. La Fig. (4.4) muestra esta comparación y los plateaus se pueden observar claramente a la temperatura de 2.67 K. Es un resultado interesante considerando que el término de intercambio usado era solamente una aproximación (LSDA), y que para la densidad electrónica la aproximación usada fue TF en lugar de un completo tratamiento usando la DFT. Con estas consideraciones es satisfactorio haber obtenido los plateaus impares que se esperaban del IQHE.

Otra diferencia es que los factores de llenado tienen una forma más rectangular en el caso con intercambio, se ve claramente comparando la Fig. (3.2) y la Fig. (4.1). En la Fig. (4.4) se evidencia claramente, en el caso con campo de 3.0 T se nota que los factores de llenado para el caso con intercambio son muy rectangulares en comparación con el factor de llenado para el caso de Hartree donde hay regiones donde cambia suavemente. Esto se debe al uso de la aproximación LSDA que tiene este efecto ya que el potencial de intercambio va como $V_x^\sigma(x) \sim \sqrt{n_s^\sigma(x)}$. En caso de usar una expresión más precisa se debería suavizar, aún así los resultados tienen sentido físico.

El potencial de intercambio también favoreció la localización de los electrones en el centro de la cinta Hall, se puede ver comparando la Fig. (3.4) con la Fig. (4.3). Esta localización se debe a la inclusión del potencial de intercambio.

En las demás características físicas las tendencias son similares, los factores de llenado pares tienen valores similares para ambos casos, los potenciales tienen aproximadamente la misma profundidad, los potenciales químicos rondan los mismos

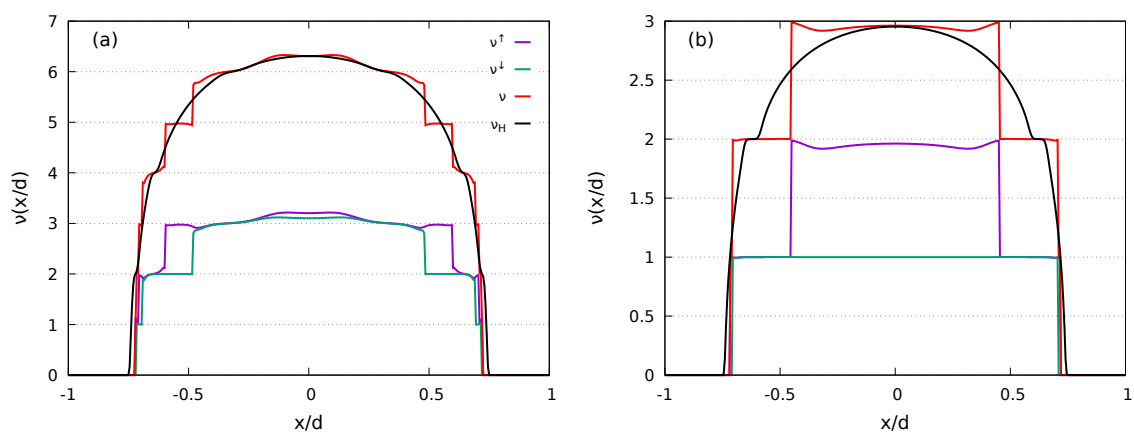


Figura 4.4: Factores de llenado dependientes del espín $\nu^\sigma(x)$, factor de llenado total $\nu(x)$, factor de llenado considerando sólo el potencial de Hartree $\nu_H(x)$ para $T = 2.67$ K y $d = 50 a_0^*$. Los campos magnéticos son $B = 1.4$ T para (a) y $B = 3.0$ T para (b).

valores, los efectos del campo magnético son similares y el efecto del ancho d de la cinta Hall también es similar. Es decir que la inclusión del intercambio fue consistente en mantener las similitudes esperadas para ambos modelos, y fue fundamental para producir las diferencias esperadas que se ajustan mejor al IQHE.

Conclusiones y perspectivas

En una *primera etapa* de esta tesis, se reprodujerom varios de los resultados obtenidos por Oh y Gerhardtts [23] de forma consistente. Es decir que se hizo un estudio del IQHE en la geometría de la cinta Hall usando la aproximación de TF y considerando sólo el potencial de Hartree, esto fue explorado en el Cap. (3). Los resultados mostraron la aparición de plateaus en los valores pares del factor de llenado $\nu(x)$; el que sólo sean valores pares se debe a que el sistema llena indistintamente los dos LL que están degenerados por el espín. La aparición de los plateaus fue explicada ya que son regiones donde la energía cinética está minimizada, además que hay un costo energético de $\hbar\omega_c$ para aumentar el factor de llenado en estas regiones y el sistema prefiere aumentar su potencial de Hartree V_H mientras le sea energéticamente conveniente; los plateaus son justamente las regiones donde para el sistema es conveniente este comportamiento. Se exploró la influencia del campo magnético en esta aproximación, demostrando que a mayor campo magnético son menos los LL necesarios para distribuir los electrones del sistema (la degeneración de un LL es proporcional al campo magnético B aplicado). El ancho de la cinta Hall determina la profundidad del potencial de Hartree (la profundidad del potencial V_H es proporcional a ancho d), lo que resultó en que los electrones se localizan más en el centro de la cinta cuando es mayor el ancho de la cinta. Se determinó la importancia de la temperatura ya que los plateaus sólo se forman a bajas temperaturas (cuando la energía $\hbar\omega_c$ es suficientemente mayor a la energía térmica $k_B T$). Posteriormente se comparó los resultados numéricos con un límite analítico de temperatura y campo magnético nulo, mostrando que los resultados numéricos son consistentes y que sirve como verificación. Finalmente se consideró el efecto de agregar el término de Zeeman a la energía de cada LL, los resultados fueron casi los mismos y los plateaus siguieron apareciendo sólo en valores pares del factor de llenado. El problema de esta sección es que deberían haber plateaus en todos los valores enteros del factor de llenado ν debido al IQHE, lo que significa que para mejorar la descripción es necesario considerar otras interacciones.

En una *segunda etapa* de esta tesis, se consideró la interacción de intercambio en el sistema. Se lo hizo considerando una aproximación de Thomas-Fermi dependiente del espín y en particular se consideró la LSDA para describir la interacción de inter-

cambio, esto fue discutido en el Cap. (4). El resultado más notorio es la aparición de plateaus para todos los valores enteros del factor de llenado $\nu(x)$ tal como se espera en el IQHE. El origen físico de los plateaus impares es diferente al de los plateaus pares ya descritos, estos se deben a que el término de Zeeman favorece que se llene el nivel de Landau con espín $\sigma = \uparrow$ ($\varepsilon_n^\uparrow = \hbar\omega_c(n + 1/2) - |g|\mu_B B/2$) antes que el de espín $\sigma = \downarrow$ ($\varepsilon_n^\downarrow = \hbar\omega_c(n + 1/2) + |g|\mu_B B/2$). La interacción de intercambio actuando en forma autoconsistente, potencia sustancialmente este efecto, permitiendo que el sistema llene primero el LL con espín $\sigma = \uparrow$ en un rango finito de densidades y posteriormente el que tiene espín $\sigma = \downarrow$. Note que en el Cap. (3) se mostró que el término de Zeeman por sí sólo no genera los plateaus impares. Se exploró la relevancia del campo magnético B , el ancho d de la cinta Hall y la temperatura T , mostrando que sus efectos son básicamente iguales a los ya descritos en el Cap. (3) (aún así todos los casos presentan plateaus en los valores impares). En general la inclusión de la interacción de intercambio describe de mejor manera el IQHE, especialmente con la aparición de plateaus para todos los valores enteros del factor de llenado ν .

La aproximación de Thomas-Fermi es un primer acercamiento a la DFT, pero su sencillez presenta una serie de ventajas para extender el trabajo aquí realizado. Lo primero a considerar es que en las muestras 2DEG donde se hacen mediciones (ver recuadro de la Fig. (1.4)) es necesario poner una corriente I según la dirección de la cinta que en este trabajo no se consideró. Esta corriente puede ser fácilmente incluida en las Ecs. (3.17) y (4.4) mediante la adición de un término que la represente dentro de la distribución de Fermi-Dirac como se hace en diversos trabajos [15, 16, 18–23]. Por lo tanto el modelo aquí descrito es aplicable para estudiar el efecto de la interacción de intercambio en sistemas 2DEG con corrientes, en el régimen del IQHE.

En este trabajo se mantuvo los potenciales en las compuertas metálicas como $V_L = V_R = 0$, como resultado las soluciones fueron siempre simétricas (condición que no fue impuesta al sistema). En caso de que se quiera estudiar el efecto de cambiar estos potenciales es necesario adicionar la Ec. (3.7) como contribución al potencial de Hartree. Otros trabajos hacen este estudio de forma similar [16, 19, 23]. Esta situación es de interés ya que se pierde la simetría del sistema pero puede describir posibles mediciones para muestras reales.

Una mejora significativa de este trabajo sería usar una mejor aproximación para la interacción de intercambio. Aquí se consideró razonable el uso la LSDA, lo cual fue suficiente para la aparición de plateaus en los factores de llenado ν impares con una relativa estabilidad y velocidad en los cálculos numéricos. Para mejorar este estudio es necesario usar un mejor aproximación para el intercambio o de ser posible introducir un término exacto como el calculado por Miravet y Proetto [38]. Durante el desarrollo de este trabajo se intentó usar otras aproximaciones para el intercambio

pero todas fueron numéricamente inestables y no convergieron a una solución, por lo que este cambio puede ser bastante más complicado de lo que inicialmente parece.

El siguiente paso de este trabajo sería el usar la DFT en lugar de la aproximación de Thomas-Fermi. En ese caso las densidades electrónicas no tendrían la forma de las Ecs. (3.17) y (4.4), en su lugar deberían ser expresiones más complicadas pero que también impliquen los potenciales de Hartree y de intercambio. Este trabajo fue un primer acercamiento al resultado que se espera en futuros trabajos se logre deducir y que permita una comparación con datos experimentales. Aún así TF fue efectivo para describir la interacción de intercambio en el IQHE para 2DEG en la geometría de una cinta Hall.

Apéndice A

Información sobre los cálculos numéricos

Para obtener los resultados numéricos era necesario la creación de un programa que resuelva el problema autoconsistente. En el caso de considerar sólo potencial de Hartree era necesario resolver el sistema $\{n_s(x), V_H(x), \mu\}$ planteado en las Ecs. (3.2), (3.13) y (3.17). En el caso de incluir el potencial de intercambio se debe resolver el sistema $\{n_s(x), V_H(x), V_x^\sigma(x), \mu\}$ planteado en las Ecs. (3.2), (3.13), (4.2) y (4.6). El algoritmo con el que se resuelve es básicamente el mismo tanto si se considera el potencial de intercambio como si no, por eso se contará el caso que incluye intercambio por ser más completo

La idea es bastante sencilla, sin embargo el cálculo numérico tiene una serie de dificultades que deben ser discutidas y tratadas de forma correcta. Este apéndice debe ser tomado como la historia recorrida para llegar hasta el protocolo con que se calcularon los resultados expuestos en los capítulos anteriores. Además se contará brevemente las ventajas que trajo programar en Mathematica en contraste con lo que se logró en C++. Note que en varias expresiones se usaran las formas normalizadas de los potenciales (\widetilde{V}_H y \widetilde{V}_x^σ) ya que fueron los usados en los cálculos numéricos.

Método autoconsistente

Se realiza una serie de cálculos autoconsistentes tal que en cada iteración se consigue un conjunto solución, en la i -ésima iteración el conjunto solución es $\{n_{s,i}(x), V_{H,i}(x), V_{x,i}^\sigma(x), \mu_i\}$, hasta que se considera que el conjunto obtenido está lo suficientemente convergido a la solución real del sistema. El proceso es iniciar con potenciales $V_{H,0}(x)$ y $V_{x,0}^\sigma(x)$ conocidos (los potenciales de la primera iteración son las semillas), los cuales al ser introducidos en la Ec. (4.4) definen toda una familia de posibles $\{n_{s,1}(x)[\mu]\}$ con un potencial químico μ para cada elemento. La manera

en que se determina el potencial químico μ_1 del sistema es con la Ec. (3.2), la cual plantea que la cantidad de electrones es constante. Una vez conocido μ_1 se conoce inequívocamente la densidad $n_{s,1}(x)$. Ahora se procede a recalculer los potenciales $V_{H,1}(x)$ y $V_{x,1}^\sigma(x)$ usando las ecuaciones 3.13 (en realidad calcular $V_{H,1}$ tiene algunas sutilezas que serán discutidas en los siguientes puntos) y 4.6 y la densidad $n_{s,1}(x)$ recién calculada. De esta forma se obtiene un conjunto solución $\{n_{s,1}(x), V_{H,1}(x), V_{x,1}^\sigma(x), \mu_1\}$ totalmente nuevo, se vuelve a realizar el mismo procedimiento hasta que se considere que se ha convergido a la solución del sistema.

Consideraciones numéricas

Discretización

Lo primero que se debe considerar es la discretización de la coordenada x . Este es un problema donde la posición x es una variable continua, sin embargo para uso numérico es preciso fijar una grilla de posibles valores para esta variable continua. Si se escogen pocos puntos el cálculo es más rápido pero se pierde mucha de la física de interés. Una grilla con pocos puntos haría que la distancia entre puntos sea mayor a la del ancho de los plateaus en cuyo caso no se vería nada del IQHE, es algo similar al hecho de que en la Fig. (4.1) no se tienen plateaus para $\nu = 1$. Una grilla con demasiados puntos volvería al cálculo demasiado lento y demandaría mucha más memoria comunicacional, además el tener muchos puntos puede ocasionar inestabilidad en los cálculos que causaría ruido estropeando todo el proceso auto-consistente. *En todos los cálculos se usaron 401 puntos para discretizar el intervalo $[-d, d]$, el cual se escogió tras prueba y error para otros posibles valores.*

Semilla

La semilla, es decir los potenciales $V_{H,0}$ y $V_{x,0}^\sigma$ para el primer autoconsistente, también deben ser escogidos de forma apropiada. Teniendo en cuenta la forma del potencial de Hartree en la Ec. (3.13), la elección más intuitiva para la semilla parece ser

$$\widetilde{V}_{H,0}(x) = -\frac{2d}{r_0^2 a_0^*} \sqrt{1 - \frac{x^2}{d^2}}, \quad (\text{A.1})$$

para el potencial de intercambio simplemente se toma $\widetilde{V}_{x,0}^\sigma = 0$. Usando estas semillas los cálculos convergieron mediante varios pasos autoconsistentes hasta la solución del sistema $\{n_s(x), V_H(x), V_x^\sigma(x), \mu\}$. Típicamente se necesitan entre 20 y 50 iteraciones para llegar a la solución convergida, para cada temperatura y campo

magnético.

Criterio de convergencia

Otro problema es establecer un buen criterio de convergencia. De una iteración a otra se notó que el potencial de Hartree V_H es el que más varía, por lo que una convergencia en este potencial es un buen indicador de que se convergió a la solución del sistema. En general se escoge un parámetro $\varepsilon > 0$ tal que se considera que se logró la convergencia en la iteración n -ésima si es que

$$\int_{-d}^d dx \left| \widetilde{V_{H,n}}(x) - \widetilde{V_{H,n-1}}(x) \right| < \varepsilon. \quad (\text{A.2})$$

La elección de este parámetro ε tiene que ser consistente con lo bien que puede ser calculado el potencial V_H , es decir que si el error con el que se calcula el potencial de Hartree es mayor a ε , entonces no tiene sentido que el parámetro de convergencia sea tan estricto (ver más abajo). *Para los cálculos anteriores se uso un parámetro de $\varepsilon = 0.001$.*

Evolución del potencial de Hartree

El hecho de que el potencial de Hartree sea el que más varía entre iteraciones puede ocasionar que las soluciones $\{n_{s,i}(x), V_{H,i}(x), V_{x,i}^\sigma(x), \mu_i\}$ y $\{n_{s,i+1}(x), V_{H,i+1}(x), V_{x,i+1}^\sigma(x), \mu_{i+1}\}$ sean demasiados diferentes cuando todavía se está lejos de la convergencia, lo que causaría que uno se aleje de la solución del sistema. Para evitar este problema se introduce un parámetro de amortiguamiento $\alpha \in [0, 1]$. Suponga que tiene la solución de la iteración n -ésima $\{n_{s,n}(x), V_{H,n}(x), V_{x,n}^\sigma(x), \mu_n\}$, usando esta solución y la Ec. (3.13) calcula un potencial $V_{int}(x)$. En lugar de introducir directamente en la siguiente iteración que $V_{H,n+1}(x) = V_{int}(x)$, se toma

$$V_{H,n+1}(x) = \alpha V_{int}(x) + (1 - \alpha) V_{H,n}. \quad (\text{A.3})$$

Con esta amortiguación el potencial de Hartree no varía tan bruscamente y permite que se converja a la solución del sistema. Un valor alto de α no permite la convergencia, mientras que un valor muy bajo hace que se necesitan demasiadas iteraciones y más tiempo para la convergencia. *Los cálculos anteriores fueron hechos para diferentes valores de amortiguación, en general se tomó $\alpha = 0.05$ pero en algunos casos (bajas temperaturas y altos campos magnéticos) se llegó hasta $\alpha = 0.01$.*

Determinación del potencial químico

Calcular el potencial químico μ dada una familia de posibles densidades $\{n_s(x)[\mu]\}$ y la Ec. (4.4) también tiene algunas complicaciones. Es claro que existe un μ único tal que

$$\bar{n} = \frac{1}{2d} \int_{-d}^d dx n_s(x)[\mu], \quad (\text{A.4})$$

donde \bar{n} tiene un valor constante (en los cálculos se usó $\bar{n} = 0.458n_0$). Para resolver esta ecuación se usó el método de la bisección [39], es un método lento pero que difícilmente falla. Usar otros métodos como el de Newton o el de Brent presentaba problemas ya que se podía caer en regiones donde dos potenciales químicos significativamente diferentes daban valores casi iguales para \bar{n} (iguales para la computadora), lo cual es fatal para estos métodos. Fue un punto donde no se pudo mejorar los programas escritos, aunque el método de la bisección no falla también ralentizó la velocidad de los cálculos. *El error permitido para el cálculo del potencial químico en cada iteración fue de 10^{-10} para todos los cálculos.*

Integral del potencial de Hartree

De la Ec. (3.20) concentrémonos solamente en la expresión

$$\int_{-1}^1 dt \tilde{n}_s(td) \ln \left| \frac{\sqrt{(1 - x^2/d^2)(1 - t^2)} + 1 - xt/d}{x/d - t} \right|. \quad (\text{A.5})$$

Es una integral particularmente difícil de resolver usando métodos numéricos. Recuerde que se toma una grilla finita de puntos para resolver el sistema, entonces para resolver esta integral es necesario usar métodos numéricos como el método del trapecio o el de Newton-Cotes. Realizar bien esta integral es fundamental para no propagar errores a la siguiente densidad n_s . Note que si se comete un error de 0.1 en el potencial de Hartree $\widetilde{V}_{H, n}$, no sirve de nada que el potencial químico μ_n tenga un error de 10^{-10} ya que al calcular $n_{s, n+1}$ el error que va a importar es el del potencial de Hartree, por lo que todos los cálculos se verán arruinados.

Regresemos a la integral, si uno se fija cuando $x = t$ (dicho x siempre existe), el integrando claramente diverge, lo que vuelve imposible tomar este punto para hacer la integral de forma numérica. Además si la grilla es de pocos puntos y se decide obviar el punto $x = t$ se tiene grandes errores en la integral.

No se logró realizar un programa en C++ capaz de calcular bien esta integral usando el método generalizado del trapecio, lo mejor que se logró es llevar el error a 0.1 que arruina por completo los cálculos. En su lugar se hizo este mismo cálculo en un programa de Mathematica, en el cual se realizó una interpolación de orden 1

a $n_s(t)$ (recuerde que se conoce sólo para cada valor de la grilla) y se pidió integrar usando el método de Newton-Cotes abierto. La ventaja de hacerlo así es que Mathematica decide qué grilla generar para calcular esta integral de forma óptima y el error pudo ser llevado tan bajo como 10^{-10} . De esta forma el error en el potencial de Hartree \widetilde{V}_H era del orden de 10^{-6} lo que permite confiar en los cálculos numéricos.

Se debe resaltar lo importante de calcular bien esta integral para que funcione todo el cálculo. Durante bastante tiempo se exploraron diversas opciones que causaba que la solución no converja hasta que se notó la importancia del error aquí. Hacerlo en Mathematica ralentiza el tiempo del programa ya que en su algoritmo propio le toma varias iteraciones decidir que grilla usar para realizar la integral numérica de forma óptima, pero es necesario para la correcta convergencia a la solución del sistema.

Algoritmo de enfriamiento

Con todas las consideraciones anteriores no es suficiente para resolver el sistema a una temperatura T arbitraria, es necesario todo un algoritmo para que el método autoconsistente converja a la solución correcta. El algoritmo de enfriamiento y calentamiento fue inicialmente sugerido por Rolf Gerhardt, el algoritmo que finalmente se usó tiene algunas modificaciones.

Suponga que se quiere resolver el problema y obtener $\{n_s(x), V_H(x), V_x^\sigma(x), \mu\}$ para una temperatura T , en general interesan temperaturas del orden de ~ 5 K para poder tener formación de plateaus. Lo primero que se hace es resolver el sistema a $T_0 = 20$ K usando como semilla el potencial de la semilla A.1. De esta manera se llega a un conjunto solución para la temperatura T_0 , lo siguiente será enfriar a $0.75T_0$ y resolver el problema usando como semilla los potenciales $V_H(x)$ y $V_x^\sigma(x)$ de la solución a temperatura T_0 . Se va a repetir este proceso n veces hasta cumplir $0.75^n T_0 > T > 0.75^{n+1} T_0$, entonces se resuelve finalmente el problema a temperatura T .

Este algoritmo de enfriamiento resuelve el sistema para todas las temperaturas de la forma $0.75^i T_0$, y usa la solución del sistema a temperatura $0.75^i T_0$ como semilla para la temperatura $0.75^{i+1} T_0$. Es por eso que las temperaturas presentadas en los resultados tienen específicamente los valores mostrados, porque eran temperaturas que se obtuvieron de este ciclo de enfriamiento. Por supuesto, el factor 0.75 es arbitrario.

Este algoritmo de enfriamiento funciona muy bien para llegar a la solución del sistema a cualquier temperatura baja T . Fue usado tanto en los programas de C++ y Mathematica, su uso fue fundamental para poder llegar a los resultados obtenidos.

Diferencias entre la programación de C++ y Mathematica

Con todas estas consideraciones se realizaron los cálculos usando programas escritos en C++ y Mathematica. Los resultados a grandes rasgos fueron consistentes entre ambos, pero en Mathematica se pudo garantizar una mayor exactitud. Por esta razón los resultados mostrados en la tesis son de los resultados obtenidos con programas escritos en Mathematica.

La diferencia más importante fue la de resolver correctamente la integral del potencial de Hartree. En C++ el error fue demasiado alto causando que los resultados no sean confiables y tengan mucho ruido. En Mathematica esto pudo ser corregido lo que otorgó mayor credibilidad a los resultados. Sin embargo esto ralentizó el tiempo de cálculo considerablemente, en C++ tomaba unos minutos (pero no convergía de forma correcta) y en Mathematica varias horas. Es bastante clara la dificultad y la importancia de resolver bien esta integral.

Otra de las diferencias más importantes es acerca de la simetría del problema. Por errores numéricos el programa de C++ no generaba soluciones simétricas, fue una condición que se tuvo que imponer y generó ruido en las cálculos. Por el contrario Mathematica generó soluciones simétricas siempre, lo que también le da una mayor confianza.

En conclusión los resultados de ambos programas son consistentes, pero la exactitud de Mathematica le da una mayor credibilidad a los resultados que generó. Todas estas cuestiones numéricas fueron de gran importancia durante el desarrollo de la tesis.

Bibliografía

- [1] Ando, T., Uemura, Y. Theory of quantum transport in a two-dimensional electron system under magnetic fields. I. Characteristics of level broadening and transport under strong fields. *Journal of the Physical Society of Japan*, **36** (4), 959, 1974.
- [2] Bastard, G. Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures. Les Editions de Physique, Les Ulis, 1988.
- [3] Chakrabort, T., Pietilainen, P. The Quantum Hall Effects. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1995.
- [4] Prange, R. E., Girvin, S. M. The Quantum Hall Effects. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1990.
- [5] Paalanen, M. A., Tsui, D. C., Gossard, A. C. Quantized hall effect at low temperatures. *Phys. Rev. B*, **25**, 5566–5569, Apr 1982. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.25.5566>.
- [6] Klitzing, K. v., Dorda, G., Pepper, M. New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized hall resistance. *Phys. Rev. Lett.*, **45**, 494–497, Aug 1980. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.45.494>.
- [7] Quinn, T. J. News from the BIPM. *Metrologia*, **26** (1), 69–74, jan 1989. URL <https://doi.org/10.1088%2F0026-1394%2F26%2F1%2F006>.
- [8] Taylor, B. N. New measurements standards for 1990. *Physics Today*, **42** (8), 23, 1989. URL <https://physicstoday.scitation.org/doi/10.1063/1.881176>.
- [9] Tsui, D. C., Stormer, H. L., Gossard, A. C. Two-dimensional magnetotransport in the extreme quantum limit. *Phys. Rev. Lett.*, **48**, 1559–1562, May 1982. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.48.1559>.

- [10] Clark, R. G. Ground states of interacting electrons in the extreme quantum limit. *Physica Scripta*, **T39**, 45–60, jan 1991. URL <https://doi.org/10.1088%2F0031-8949%2F1991%2Ft39%2F005>.
- [11] Weitz, P., Ahlswede, E., Weis, J., Klitzing, K., Eberl, K. Hall-potential investigations under quantum hall conditions using scanning force microscopy. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, **6** (1), 247 – 250, 2000. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1386947799001368>.
- [12] Ahlswede, E., Weitz, P., Weis, J., von Klitzing, K., Eberl, K. Hall potential profiles in the quantum hall regime measured by a scanning force microscope. *Physica B: Condensed Matter*, **298** (1), 562 – 566, 2001. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0921452601003830>, international Conference on High Magnetic Fields in Semiconductors.
- [13] Weitz, P., Ahlswede, E., Weis, J., Klitzing, K., Eberl, K. A low-temperature scanning force microscope for investigating buried two-dimensional electron systems under quantum hall conditions. *Applied Surface Science*, **157** (4), 349 – 354, 2000. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169433299005504>.
- [14] Ahlswede, E., Weis, J., v. Klitzing, K., Eberl, K. Hall potential distribution in the quantum hall regime in the vicinity of a potential probe contact. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, **12** (1), 165 – 168, 2002. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1386947701002673>, proceedings of the Fourteenth International Conference on the Electronic Properties of Two-Dimensional Systems.
- [15] Panos, K., Gerhardts, R. R., Weis, J., von Klitzing, K. Current distribution and hall potential landscape towards breakdown of the quantum hall effect: a scanning force microscopy investigation. *New Journal of Physics*, **16** (11), 113071, nov 2014. URL <https://doi.org/10.1088%2F1367-2630%2F16%2F11%2F113071>.
- [16] Gerhardts, R. R., Panos, K., Weis, J. Current-induced asymmetries of incompressible strips in narrow quantum hall systems. *New Journal of Physics*, **15** (7), 073034, jul 2013. URL <https://doi.org/10.1088%2F1367-2630%2F15%2F7%2F073034>.

- [17] Pascher, N., Rössler, C., Ihn, T., Ensslin, K., Reichl, C., Wegscheider, W. Imaging the conductance of integer and fractional quantum hall edge states. *Phys. Rev. X*, **4**, 011014, Jan 2014. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevX.4.011014>.
- [18] Chklovskii, D. B., Matveev, K. A., Shklovskii, B. I. Ballistic conductance of interacting electrons in the quantum hall regime. *Phys. Rev. B*, **47**, 12605–12617, May 1993. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.47.12605>.
- [19] Lier, K., Gerhardts, R. R. Self-consistent calculations of edge channels in laterally confined two-dimensional electron systems. *Phys. Rev. B*, **50**, 7757–7767, Sep 1994. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.50.7757>.
- [20] Güven, K., Gerhardts, R. R. Self-consistent local equilibrium model for density profile and distribution of dissipative currents in a hall bar under strong magnetic fields. *Phys. Rev. B*, **67**, 115327, Mar 2003. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.67.115327>.
- [21] Siddiki, A., Gerhardts, R. R. Incompressible strips in dissipative hall bars as origin of quantized hall plateaus. *Phys. Rev. B*, **70**, 195335, Nov 2004. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.70.195335>.
- [22] Gerhardts, R. R. The effect of screening on current distribution and conductance quantisation in narrow quantum hall systems. *physica status solidi (b)*, **245** (2), 378–392, 2008.
- [23] Oh, J. H., Gerhardts, R. R. Self-consistent thomas-fermi calculation of potential and current distributions in a two-dimensional hall bar geometry. *Phys. Rev. B*, **56**, 13519–13528, Nov 1997. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.56.13519>.
- [24] Chklovskii, D. B., Shklovskii, B. I., Glazman, L. I. Electrostatics of edge channels. *Phys. Rev. B*, **46**, 4026–4034, Aug 1992. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.46.4026>.
- [25] Parr, R., Weitao, Y. Density-functional theory of atoms and molecules. Oxford Universit press, 1989.
- [26] Engel, E., Dreizler, R. M. Density Functional Theory. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2011.

- [27] Hohenberg, P., Kohn, W. Inhomogeneous electron gas. *Phys. Rev.*, **136**, B864–B871, Nov 1964. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.136.B864>.
- [28] Kohn, W., Sham, L. J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Phys. Rev.*, **140**, A1133–A1138, Nov 1965. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.140.A1133>.
- [29] Van Noorden, R., Maher, B., Nuzzo, R. The top 100 papers. *Nature*, **514**, 550–3, 10 2014.
- [30] Giuliani, G., Vignale, G., Press, C. U. Quantum Theory of the Electron Liquid. Masters Series in Physics and Astronomy. Cambridge University Press, 2005.
- [31] Kittel, C. Introduction to Solid State Physics. Wiley, 2004.
- [32] Ashcroft, N., Mermin, N. Solid State Physics. Cengage Learning, 2011.
- [33] Churchill, R., Brown, J. Complex Variables and Applications. McGraw-Hill Higher Education, 2004.
- [34] Needham, T. Visual Complex Analysis. Comparative Pathobiology - Studies in the Postmodern Theory of Education. Clarendon Press, 1998.
- [35] Abramowitz, M., Stegun, I. A. Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables. ninth dover printing, tenth gpo printing ed^{ón}. New York: Dover, 1964.
- [36] Daniel, M. M. Efectos de la Interacción electrón-electrón y Campos Magnéticos en Gases Bidimensionales de electrones. Tesis Doctoral, Universidad Nacional de Cuyo, March 2019.
- [37] Blundell, S. Magnetism in Condensed Matter. Oxford Master Series in Condensed Matter Physics. OUP Oxford, 2001.
- [38] Miravet, D., Proetto, C. R. Exact-exchange density functional theory of the integer quantum hall effect: strict 2d limit. *The European Physical Journal B*, **91** (6), 129, Jun 2018. URL <https://doi.org/10.1140/epjb/e2018-90140-7>.
- [39] Rudin, W. Principles of Mathematical Analysis. International series in pure and applied mathematics. McGraw-Hill, 1976.

Agradecimientos

A mi director César Proetto, que con infinita paciencia me ha guiado durante este duro trayecto. Gracias por su sabiduría y motivación que fueron decisivos para que disfrutara el hacer este trabajo. Gracias por todo el tiempo que me dedicó, por sus enseñanzas sobre la vida y la física. Estaré eternamente agradecido por la oportunidad que me brindó.

A mis padres y mi hermana, que me brindaron siempre su apoyo incondicional. Gracias por recordarme que siempre cuento con ustedes para cada una de mis decisiones.

A Gabriela, quien me brindó apoyo absolutamente todos los días y creyó siempre en mí. Gracias por lo nuestro.

A Daniel Miravet, quien me ayudó durante toda la maestría y se preocupó siempre de mí. Gracias por todas las buenas ideas y las charlas sin las cuales este trabajo no sería posible.

A Rolf Gerhardts, quien me proveyó de ideas sin las cuales este trabajo no hubiera sido posible.

A mis profesores Pablo Pedrazzini, Karen Hallberg, Armando Aligia, Pablo Cornaglia y Javier Fuhr por todo su esmero en enseñarme física.

A Gisela Bocán, María José Sánchez, Alexander D. Hernández por aceptar ser miembros del tribunal que evalúa este trabajo.

A toda la gente del grupo de Teoría de la Materia Condensada por el apoyo dado en todos los días de convivencia.

A la Argentina y la CNEA, qué mi brindaron la oportunidad de estudiar aquí dándome el soporte necesario para mi estadía en Bariloche durante estos años. Agradezco al Instituto Balseiro por darme la oportunidad de estudiar con excelentes profesores.

A todos los buenos amigos que hice en Argentina, Mariano, Meli, Nair, Alejo y Felipe.

A todos mis amigos que me han apoyado a la distancia este tiempo. Especialmente gracias a Joel.

